

EMÍLIO GRACILIANO FERREIRA MERCURI

**MODELO COMPUTACIONAL PARA DESCREVER O REMODELAMENTO
ÓSSEO NO MOVIMENTO ORTODÔNTICO USANDO POTENCIAIS
TERMODINÂMICOS GENERALIZADOS E OTIMIZAÇÃO**

**CURITIBA
2009**

EMÍLIO GRACILIANO FERREIRA MERCURI

**MODELO COMPUTACIONAL PARA DESCREVER O REMODELAMENTO
ÓSSEO NO MOVIMENTO ORTODÔNTICO USANDO POTENCIAIS
TERMODINÂMICOS GENERALIZADOS E OTIMIZAÇÃO**

Dissertação apresentada ao Programa
de Pós-Graduação em Métodos Numéricos
em Engenharia, Setor de Tecnologia,
Universidade Federal do Paraná.

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Mildred Ballin
Hecke

**CURITIBA
2009**

TERMO DE APROVAÇÃO

EMÍLIO GRACILIANO FERREIRA MERCURI

MODELO COMPUTACIONAL PARA DESCREVER O REMODELAMENTO ÓSSEO NO MOVIMENTO ORTODÔNTICO USANDO POTENCIAIS TERMODINÂMICOS GENERALIZADOS E OTIMIZAÇÃO

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciências, pelo Programa de Pós-Graduação de Métodos Numéricos em Engenharia, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, pela banca examinadora:

Prof^a. Mildred Ballin Hecke, D. Sc.
Universidade Federal do Paraná
(Orientadora)

Prof. Eduardo Alberto Fancello, D. Sc.
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Roberto Dalledone Machado, D. Eng.
Universidade Federal do Paraná

Prof. Claudio Roberto Avila da Silva Junior, D. Eng.
Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR

EPÍGRAFE

“Caminhante, são os teus passos
o caminho e nada mais;
Caminhante, não há caminho,
O caminho faz-se a andar.
A andar faz-se o caminho,
e ao voltar a vista atrás
vê-se a senda que nunca
se há-de voltar a pisar.
Caminhante não há caminho
só sulcos no mar.”

[Antonio Machado (1875-1939)]
(Proverbios y cantares XXIX) in Campos de Castilla

“All truths are easy to understand once they are
discovered, the point is to discover them.”
[Galileo Galilei (1564-1642)]

AGRADECIMENTOS

Agradeço à professora Mildred, pelos longos anos de aprendizado e convivência como mãe acadêmica, e por me instigar a estudar a natureza e o corpo humano com a visão da engenharia e em especial da bioengenharia.

À minha família: ao meu pai Edison Mercuri e à minha querida mãe Erica Lopes Ferreira pela educação, pelos conceitos morais e pelo incentivo a entrar no mundo da pesquisa. Ao meu irmão Eduardo Galeano Ferreira Mercuri pelo companheirismo e amizade. Agradeço aos três pelo carinho, amor e companhia.

Agradecimentos especiais à Maristela, pela simpatia e por sempre ajudar quando fosse preciso, ao CESEC (Centro de estudos de Engenharia Civil) pelo espaço físico e pelos computadores e ao PPGMNE e seus professores.

Aos colegas em especial agradeço à Flavia Tormena que na reta final da dissertação teve uma importância crucial no desenvolvimento da teoria do trabalho e em especial agradeço também à Larissa Akemi Rosa Utiyama de Freitas por fornecer códigos em FORTRAN e ajudar muito nas fases de programação e de teoria. Agradeço à dentista Lucila Largura que gentilmente colaborou com seus conhecimentos teóricos e práticos da área biológica e especificamente na área da ortodontia.

Aos verdadeiros amigos, com quem me diverti nos momentos de descontração e descanso.

SUMÁRIO

| | |
|--|-----|
| LISTA DE FIGURAS | 22 |
| LISTA DE QUADROS | 24 |
| LISTA DE TABELAS | 25 |
| LISTA DE SIGLAS | 26 |
| LISTA DE SÍMBOLOS | 27 |
| RESUMO | 27 |
| 1. INTRODUÇÃO | 17 |
| 1.1. Objetivos | 19 |
| 1.1.1. Objetivos Gerais | 19 |
| 1.1.2. Objetivos Específicos | 19 |
| 1.2. Estrutura do Trabalho | 19 |
| 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA | 21 |
| 2.1. Tecido Ósseo | 21 |
| 2.2. Composição do Osso | 26 |
| 2.3. Células Ósseas e o Hormônio PTH | 28 |
| 2.4. Mineralização | 30 |
| 2.5. Características Mecânicas e Experimentais do Osso | 31 |
| 2.6. Dano no Osso | 34 |
| 2.7. Biomecânica e o Tratamento Ortodôntico | 38 |
| 3. REMODELAMENTO ÓSSEO E POTENCIAIS TERMODINÂMICOS | 45 |
| 3.1. Segunda Lei da Termodinâmica, Dissipação e Energia Livre | 45 |
| 3.2. Variáveis de Estado | 46 |
| 3.3. Variáveis Externas | 46 |
| 3.4. Variáveis Internas | 47 |
| 4. FORMULAÇÃO VARIACIONAL | 58 |
| 4.1. Formulação Variacional em Taxas | 62 |
| 4.2. Formulação em Incrementos Finitos | 64 |
| 5. ALGORITMOS PARA SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE DANO E HEALING | 67 |
| 5.1. Método dos Elementos Finitos | 67 |
| 5.2. Algoritmos para a resolução do problema de equilíbrio | 69 |
| 5.3. Algoritmos para a resolução da equação constitutiva | 74 |
| 5.4. Aplicação do Algoritmo de Newton-Raphson para o modelo de dano e healing | 78 |
| 5.5. Descrição do Programa Desenvolvido | 82 |
| 6. MODELAGEM | 86 |
| 6.1. Simulações Realizadas | 86 |
| 6.1.1. Exemplo unidimensional de um corpo de prova sobre tração | 86 |
| • Fase inicial do material | 89 |
| • Fase de perda de rigidez do material | 89 |
| • Fase de ganho de rigidez do material | 91 |
| 6.1.2. Modelo bidimensional representando uma trabécula óssea com densidade dependente das variáveis internas | 92 |
| 6.1.3. Aplicações na Ortodontia – Modelo bidimensional representando um dente e o osso cortical ao seu redor – Modelo isotrópico | 94 |
| 7. RESULTADOS | 100 |
| 7.1. Modelo unidimensional | 100 |
| 7.1.1. Rigidez inicial constante | 101 |
| 7.1.2. Dano inicial | 103 |
| 7.2. Modelo bidimensional de uma Trabécula Óssea | 105 |
| 7.3. Modelo Isotrópico – Aplicação na Ortodontia | 111 |
| 8. DISCUSSÃO E CONCLUSÃO | 114 |
| 9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 117 |

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|-----|
| Figura 1– Corte longitudinal de um osso longo. | 22 |
| Figura 2 – Ossos do Corpo Humano. | 22 |
| Figura 3 - Foto de um osso trabecular. | 24 |
| Figura 4 - Fotos dos dois tipos de osso: trabecular e cortical (MARTIN et al., 1998 apud Rüberg, 2003) | 24 |
| Figura 5 – Osso Cortical e Osso Trabecular. Imagem representando uma seção transversal de um osso longo humano. | 25 |
| Figura 6 – Ósteon, Osteócito e Canais Haversianos. | 25 |
| Figura 7 – Fibras de colagêneo entre as células ósseas (Simões, 2008). | 27 |
| Figura 8 – Células Ósseas (Simões, 2008). | 29 |
| Figura 9 – Glândulas da Paratireóide. Dois pares de glândulas endócrinas | 30 |
| Figura 10 – Diagrama tensão x deformação para duas vértebras humanas com diferentes densidades aparentes iniciais (ρ), (Kopperdahl e Keaveny, 1998). | 33 |
| Figura 11 – Ilustração de um corpo de prova ósseo | 33 |
| Figura 12 - Evolução qualitativa do dano para compressão (linha contínua) e tração (linha pontilhada) até o momento de fadiga em função do número de ciclos de carga normalizado N / N_f para um nível constante de deformação ε aplicado. | 35 |
| Figura 13 – Módulo de Elasticidade na compressão e na tração em função da densidade aparente e a regressão linear correspondente (Kopperdahl e Keaveny, 1998). | 37 |
| Figura 14 – As tensões de começo do dano na compressão e na tração apresentaram forte correlação com a densidade aparente (Kopperdahl e Keaveny, 1998). | 37 |
| Figura 15 - Esquema mostrando a rotação de um dente. | 39 |
| Figura 16 – Esquema de (a) um osso longo fraturado que curou de maneira curvada submetido a carregamento devido ao peso, (b) um dente carregado lateralmente, (c), um pé ao caminhar, destacando a região do calcâneo. (Fonte: Epker & Frost, 1965). | 42 |
| Figura 17 – Representação da seção transversal de um dente. | 44 |
| Figura 18 - Função base (φ_i) formada a partir das funções de forma (Freitas, 2008). | 68 |
| Figura 19 – Forma como o programa desenvolvido encontra-se estruturado. | 84 |
| Figura 20 – Fluxograma da subrotina do problema constitutivo. | 85 |
| Figura 21 – Figura de dois elementos unidimensionais numa representação | 86 |
| Figura 22 – Diagrama tensão-deformação para o material na fase inicial. | 89 |
| Figura 23 – Diagrama tensão-deformação para o material na fase de perda de rigidez. | 90 |
| Figura 24 – Diagrama tensão-deformação para o material na fase de ganho de rigidez. | 92 |
| Figura 25 – Estrutura do osso esponjoso. Detalhe em vermelho mostrando uma trabécula óssea (Adaptado de Simões, 2008). | 93 |
| Figura 26 – Modelo bidimensional de uma Trabécula. | 93 |
| Figura 27 – Malha de Elementos Finitos, pontos de Gauss e condições de contorno. | 93 |
| Figura 28 - Radiografia dos incisivos centrais superiores. | 95 |
| Figura 29 – Malha de Elementos Finitos com as condições de contorno de pressão em vermelho e de deslocamento zero em roxo. | 95 |
| Figura 30 – Remodelamento ósseo na compressão. | 98 |
| Figura 31 – Remodelamento ósseo na tração. | 98 |
| Figura 32 – Modelo unidimensional simulado. | 100 |
| Figura 33 – Diagrama Tensão – Deformação para o Elemento 1. | 101 |
| Figura 34 – Evolução das variáveis internas para o Elemento 1 com os passos de carga. | 102 |
| Figura 35 – Evolução do módulo de elasticidade do Elemento 1 com os passos de carga. | 102 |
| Figura 36 – Diagrama Tensão – Deformação para os Elementos 1 e 2. | 104 |
| Figura 37 – Evolução das variáveis internas para os Elementos 1 e 2 com os passos de carga. | 104 |
| Figura 38 – Evolução do módulo de elasticidade para os Elementos 1 e 2 com os passos de carga. | 104 |
| Figura 39 – Processo celular do remodelamento ósseo trabecular (Doblaré et al, 2004). | 105 |
| Figura 40 – Modelo bidimensional de uma trabécula óssea. | 105 |
| Figura 41 – Distribuição das deformações na direção x do modelo. | 106 |
| Figura 42 – Distribuição das deformações na direção x do modelo. | 106 |
| Figura 43 – Evolução da variável interna de dano para a trabécula óssea. | 107 |
| Figura 44 – Evolução da variável interna de ganho de rigidez para a trabécula óssea. | 108 |
| Figura 45 – Evolução da distribuição do módulo de elasticidade para o modelo da trabécula. | 110 |
| Figura 46 – Distribuição da Magnitude de Tensões (Pa) ao final do passo de carga 400. | 111 |
| Figura 47 – Distribuição das Tensões (Pa) na direção xy ao final do passo de carga 400. | 111 |

| | |
|---|-----|
| Figura 48 – Distribuição das Tensões (Pa) na direção y ao final do passo de carga 400. | 111 |
| Figura 49 – Distribuição das Tensões (Pa) na direção x ao final do passo de carga 400. | 111 |
| Figura 50 – Distribuição das Deformações (10^{-6} – Micro Strain) na direção y ao final do passo de carga 400.. | 112 |
| Figura 51 - Distribuição das Deformações (10^{-6} – Micro Strain) na direção x ao final do passo de carga 400. . | 112 |
| Figura 52 – Distribuição das Densidades (Kg/m^3) ao final do passo de carga 1..... | 112 |
| Figura 53 – Distribuição das Densidades (Kg/m^3) ao final do passo de carga 400..... | 112 |

LISTA DE QUADROS

| | |
|---|----|
| Quadro 1 - Resumo das equações da elasticidade e do remodelamento..... | 56 |
| Quadro 2 - ALGORITMO DO MÉTODO DE QUASE-NEWTON COM EQUAÇÃO DE ATUALIZAÇÃO BFGS. | 72 |
| Quadro 3 - QUADRO DO MÉTODO SECANTE UTILIZADO PARA DETERMINAR O TAMANHO DO PASSO α_k | 73 |
| Quadro 4 - ALGORITMO PARA RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE COMPLEMENTARIDADE NÃO LINEAR..... | 76 |
| Quadro 5 – ALGORITMO DE NEWTON-RAPHSON PARA PROBLEMAS ENVOLVENDO MATERIAIS COM DANO E HEALING E CRITÉRIO DE EVOLUÇÃO DA REGIÃO P DEFINIDO POR UMA ÚNICA FUNÇÃO DE ESCOAMENTO..... | 77 |
| Quadro 6 – ALGORITMO DE RESOLUÇÃO DO MODELO DESENVOLVIDO. | 97 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|-----|
| Tabela 1 - Regressões lineares e de potência relacionando propriedades mecânicas com a densidade aparente para o osso trabecular vertebral humano. | 36 |
| Tabela 2 - Médias e desvios-padrão para as propriedades dos ossos. | 38 |
| Tabela 3 – Dados de Entrada do Programa. | 94 |
| Tabela 4 – Parâmetros do Material | 94 |
| Tabela 5 - Características Materiais do Modelo de Elementos Finitos. | 96 |
| Tabela 3 - Deformações que delimitam a zona morta para tração e compressão, valores em Micro Strain. | 99 |
| Tabela 7 – Parâmetros materiais da simulação unidimensional. | 100 |
| Tabela 8 – Parâmetros de entrada da simulação com rigidez inicial dos elementos constante. | 101 |
| Tabela 9 – Parâmetros de entrada da simulação com rigidez inicial dos elementos constante. | 103 |

LISTA DE SIGLAS

| | |
|-----------|---|
| ATP | Adenosina tri-fosfato |
| CESEC | Centro de estudos de Engenharia Civil Professor Inaldo Ayres Vieira |
| CNPq | Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico |
| CRot | Centro de rotação |
| CRes | Centro de resistência |
| FORTTRAN | Linguagem de Programação, "FORmula TRANslation" |
| GCC | GNU Compiler Collection |
| GNUPLOT | Programa de linha de comando para plotar gráficos |
| GFORTTRAN | Compilador de Fortran para Linux |
| GNU | Projeto de um sistema operacional livre |
| ITMAX | Número máximo de iterações |
| LPD | Ligamento periodontal |
| MEF | Método dos Elementos Finitos |
| PPGMNE | Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos aplicados à Engenharia |
| PTH | Hormônio da paratireóide ou paratormônio |
| REMOLD 1D | Nome do Software unidimensional desenvolvido nesta dissertação |
| REMOLD 2D | Nome do Software bidimensional desenvolvido nesta dissertação |
| UFPR | Universidade Federal do Paraná |
| TOLX | Tolerância do Quase-Newton |
| VTK | Visualization Tool Kit |

LISTA DE SÍMBOLOS (em ordem aparição)

| | |
|---------------------------|--|
| V_T | Volume de Total |
| V_V | Volume de Vazios |
| V_B | Volume do tecido ósseo |
| p | Porosidade |
| ρ | Densidade aparente |
| ρ_t | Densidade com porosidade nula |
| V_O | Volume de constituintes orgânicos |
| V_M | Volume de constituintes minerais |
| V_A | Volume de água |
| m_S | Massa seca de osso |
| m_O | Massa de constituintes orgânicos |
| m_M | Massa de constituintes inorgânicos ou minerais |
| g_m | Grau de mineralização |
| $g_m(t)$ | Grau de mineralização em função do tempo |
| g_m^{\max} | Grau de mineralização máximo |
| g_m^0 | Grau de mineralização inicial |
| k_{gm} | Parâmetro que determina o formato da curva de mineralização |
| t | Tempo |
| E | Módulo de Elasticidade ou Módulo de Young |
| ν | Coeficiente de Poisson |
| k_e | Constante do ajuste do módulo de Elasticidade em função da densidade |
| l | Constante do ajuste do módulo de Elasticidade em função da densidade |
| d | Escalar de dano |
| \mathbf{D} | Tensor de dano |
| E_0 | Módulo de Elasticidade inicial |
| \dot{d} | Derivada temporal do escalar de dano |
| $\partial d / \partial N$ | Derivada do escalar de dano em relação ao número de ciclos de carga |
| N | Número de ciclos de carga |
| t_f | Tempo para a falha |
| N_f | Número de ciclos de carga para falha |
| d_c | Dano na compressão |
| C_1 | Constante experimental 1 da lei do dano na compressão |
| C_2 | Constante experimental 2 da lei do dano na compressão |
| δ_1 | Constante 1 do expoente da medida de deformação na lei do dano |
| $\tilde{\epsilon}$ | Medida de Deformação |

| | |
|---------------------|--|
| d_i | Dano na tração |
| C_3 | Constante experimental 3 da lei do dano na compressão |
| C_4 | Constante experimental 4 da lei do dano na compressão |
| C_5 | Constante experimental 5 da lei do dano na compressão |
| δ_2 | Constante 2 do expoente da medida de deformação na lei do dano |
| a | Coeficiente do ajuste do módulo de Elasticidade em função da densidade |
| b | Coeficiente do ajuste do módulo de Elasticidade em função da densidade |
| r^2 | Erro médio quadrático |
| S | Entropia |
| Q | Calor trocado com o exterior |
| θ | Temperatura absoluta do sistema |
| φ | Termo representando a dissipação |
| σ | Tensor das tensões |
| ε | Tensor de deformações |
| Ψ | Energia livre de <i>Helmholtz</i> |
| $\dot{\varepsilon}$ | Taxa temporal de deformações |
| $\dot{\theta}$ | Taxa temporal da temperatura |
| $\dot{\Psi}$ | Gradiente da Energia Livre |
| $\{\alpha_d\}_i$ | Variáveis internas de Perda de Rigidez |
| $\{\alpha_h\}_j$ | Variáveis internas de Ganho de Rigidez |
| α_d | Variável de Perda de Rigidez |
| α_h | Variável de Ganho de Rigidez |
| D | Tensor constitutivo do remodelamento |
| D_0 | Tensor constitutivo do material íntegro |
| ν_0 | Coeficiente de Poisson Inicial |
| ε_z | Deformação na direção z |
| ε_x | Deformação na direção x |
| ε_y | Deformação na direção y |
| σ_z | Tensão na direção z |
| σ_x | Tensão na direção x |
| σ_y | Tensão na direção y |
| $\dot{\alpha}_d$ | Taxa temporal da variável interna de perda |
| $\dot{\alpha}_h$ | Taxa temporal da variável interna de ganho |
| A_d | Força Termodinâmica de Dano |
| A_h | Força Termodinâmica de Healing |
| Ψ_C | Potencial Termodinâmico Complementar |

| | |
|----------------|---|
| Ψ_0 | Potencial de Energia Inicial |
| D_0^{-1} | Inversa do tensor constitutivo do material íntegro |
| P | Região Admissível (espaço de tensões generalizadas admissíveis) |
| P_Γ | Fronteira da Região Admissível |
| P_Ω | Interior da Região Admissível |
| f | Função de perda ou de ganho de rigidez, “Função de escoamento” |
| f_{proj} | Função de perda ou de ganho de rigidez projetada no plano de Tensões xy |
| P_A | Região das forças termodinâmicas admissíveis |
| χ | Função suporte de P_A |
| A^* | Força termodinâmica admissível |
| λ | Multiplificador de Lagrange |
| j | Potencial de dissipação |
| j_c | Potencial complementar de dissipação |
| $\dot{\sigma}$ | Taxa temporal do tensor de tensões |
| \dot{A}^d | Taxa temporal da força termodinâmica de perda de rigidez |
| \dot{A}^h | Taxa temporal da força termodinâmica de ganho de rigidez |
| U | Deslocamento |
| \dot{f} | Gradiente da Função de perda ou de ganho de rigidez |
| B_0 | Configuração Inicial de um corpo no espaço |
| B_i | Configuração Particular de um corpo no espaço |
| ∇u | Tensor gradiente de deslocamento |
| x | Posição de um ponto |
| X | Posição inicial de um ponto |
| dx | Incremento de deslocamento |
| \mathcal{D} | Operador linear de deformações |
| W | Espaço vetorial das taxas de deformações |
| U | Núcleo do Operador \mathcal{D} |
| B | Interior de um corpo |
| Γ_u | Parte do contorno de B onde estão os deslocamentos prescritos |
| Γ | Contorno de B |
| L_t | Forças que podem atuar sobre um corpo em um instante t |
| P_e | Potência virtual externa |
| V | Campo de velocidades |
| V | Espaço vetorial do campo de velocidades |
| V^* | Espaço dual topológico de V |
| b_t | Forças de corpo |
| τ_t | Forças de Superfície |
| Γ_τ | Parte do Contorno onde estão aplicadas as forças |

| | |
|----------------------------|---|
| P_i | Potência Virtual interna |
| W^* | Espaço dual topológico de W |
| n | Vetor unitário da direção da aplicação da tensão |
| σ^* | Tensões auto-equilibradas |
| S^0 | Subespaço das tensões auto-equilibradas |
| \dot{u} | Velocidades cinematicamente admissíveis |
| $\dot{\varepsilon}^*$ | Taxa de deformação admissível |
| $u_{t+\Delta t}$ | Deslocamentos no tempo $t+\Delta t$ |
| $\varepsilon_{t+\Delta t}$ | Deformação no tempo $t+\Delta t$ |
| $\sigma_{t+\Delta t}$ | Tensão no tempo $t+\Delta t$ |
| $A_{t+\Delta t}^d$ | Força termodinâmica de perda de rigidez no instante $t+\Delta t$ |
| $A_{t+\Delta t}^h$ | Força termodinâmica de ganho de rigidez no instante $t+\Delta t$ |
| $\alpha_{t+\Delta t}^d$ | Variável interna de perda de rigidez no instante $t+\Delta t$ |
| $\alpha_{t+\Delta t}^h$ | Variável interna de ganho de rigidez no instante $t+\Delta t$ |
| Δu | Incremento de deslocamento |
| $\Delta \varepsilon$ | Incremento de deformação |
| $\Delta \sigma$ | Incremento de tensão |
| ΔA^d | Incremento de força termodinâmica de perda de rigidez |
| ΔA^h | Incremento de força termodinâmica de ganho de rigidez |
| $\Delta \alpha^d$ | Incremento da variável interna de perda de rigidez |
| $\Delta \alpha^h$ | Incremento da variável interna de ganho de rigidez |
| $L_{t+\Delta t}$ | Forças que podem atuar sobre um corpo em um instante $t+\Delta t$ |
| \bar{j} | Potencial de dissipação em incrementos |
| \bar{j}_C | Potencial complementar de dissipação em incrementos |
| φ_i | Função Base |
| Ω_e | Elemento Finito |
| Δb | Incremento das forças de corpo |
| $\Delta \tau$ | Incremento das forças de superfície |
| ΔU^i | Vetor dos deslocamentos |
| $\Delta \hat{U}^i$ | Vetor contendo as componentes x e y dos deslocamentos nodais |
| ψ^i | Funções de forma |
| N^i | Matriz contendo as funções de forma |
| Φ | Resíduo das forças internas subtraídas das forças externas |
| F_{int} | Forças internas |
| ΔF_{int} | Incremento das forças internas |
| F_{ext} | Forças externas |

| | |
|------------------|--|
| ΔF_{ext} | Incremento das forças externas |
| B_i | Operador do Método dos Elementos Finitos |
| B_k | Matriz simétrica não singular do método de otimização na iteração k |
| y_k | Diferença entre os Resíduos da iteração $k+1$ e da iteração k |
| s_k | Diferença entre os deslocamentos da iteração $k+1$ e da iteração k |
| ϖ | Variável do método de Quase-Newton |
| H_k | Matriz do Hessiano |
| $\Delta\lambda$ | Incremento do multiplicador plástico |
| ∂Ind_P | Indicatriz do conjunto P |
| Θ | Matriz do Método de Quase-Newton |
| Q | Matriz empregada para definir a forma quadrática da função de escoamento |
| \overline{G} | Vetor empregado para definir a forma quadrática da função de escoamento |
| G | Vetor empregado para definir o primeiro invariante do tensor de tensões |
| C | Matriz elástica |
| \mathfrak{D} | Operador linear de deformações |
| J | Matriz empregada para definir o quadrado do primeiro invariante do tensor de tensões |
| M | Matriz utilizada para definir o segundo invariante do tensor de tensões desviador |
| χ | Energia dissipada ou introduzida no sistema |
| μ | Parâmetro Material da função f |
| β | Parâmetro Material da função f |

RESUMO

Esta dissertação aborda a modelagem constitutiva do osso e o estudo do remodelamento ósseo. É comum encontrar na literatura a idéia de que a remodelação óssea aparece não só como uma adaptação funcional, mas também como a necessidade de remoção de danos da estrutura óssea na forma de microfissuras e microfraturas. Recentemente, a teoria da termodinâmica com variáveis internas tem sido aplicada à modelagem constitutiva dos materiais vivos. Segundo essa teoria, o comportamento constitutivo de um material é completamente definido por dois potenciais termodinâmicos: um potencial de energia e um potencial de dissipação. As leis de estado que relacionam variáveis de estado (deformações e variáveis internas) com variáveis associadas (tensões e forças termodinâmicas) são obtidas a partir do potencial de energia, enquanto as leis de fluxo derivam do potencial de dissipação. A energia livre de Helmholtz foi utilizada para definição do potencial de energia. O processo de remodelação óssea acopla ações de reabsorção e formação óssea, processos esses executados pelas células ósseas osteoclastos e osteoblastos. As variações hormonais também atuam como inibidores e/ou ativadores destas células, assim como os níveis de deformação. O objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de um modelo numérico-computacional que permita simular o comportamento do tecido ósseo submetido a cargas. Como aplicação da teoria foi modelado um exemplo do tratamento ortodôntico. O Método dos Elementos finitos é utilizado para a discretização espacial e a resolução das equações de equilíbrio e das equações constitutivas são resolvidas por algoritmos de programação matemática. A região de tensões generalizadas admissíveis, por sua vez, surge naturalmente na abordagem termodinâmica quando a forma do potencial de dissipação é conhecida previamente. Evidencia-se que é possível formular modelos constitutivos para materiais vivos segundo o enfoque termodinâmico, aplicando técnicas e conceitos bem estabelecidos da análise convexa e da otimização. Demonstra-se que, para o modelo em estudo, o potencial de dissipação pode ser obtido a partir da resolução de um problema de otimização pela técnica de multiplicadores de Lagrange. As simulações foram realizadas com um programa desenvolvido na linguagem FORTRAN onde foi possível analisar a distribuição de tensões, deformações, rigidez e densidades na matriz óssea utilizando um pós processamento no software Paraview®, que possui código aberto e utiliza rotinas em VTK (Visualization Tool Kit).

Palavras-chave: Remodelação Óssea, Potenciais Termodinâmicos Generalizados, Movimento Ortodôntico, Elementos Finitos, Otimização.

ABSTRACT

This dissertation deals with the constitutive modeling of the bone and the study of bone remodeling. It has been common to find in literature the idea of that bone remodeling happens not only as a functional adaptation, but as the need for removal of damage to bone structure in the form of microcracks and microfractures. Recently, the theory of thermodynamics with internal variables has been applied to constitutive modeling of living materials. According to this theory, the constitutive behavior of a material is completely defined by two thermodynamic potentials: an energy potential and a dissipation potential. The laws that relate the state variables (deformations and internal variables) with associated variables (stresses and thermodynamic forces) are obtained from the potential energy, while the laws of flow are derived from the dissipation potential. The Helmholtz free energy was used for the definition of potential energy. The process of bone remodeling engages actions of bone formation and resorption, these processes are done by bone cells osteoblasts and osteoclasts. The hormonal changes also act as inhibitors and/or activators of these cells, and levels of deformation. The aim of this dissertation is the development of a numerical-computational model that allows simulating the behavior of bone subjected to loads. There is one example of simulation of the orthodontic treatment as an application of the theory. The Finite Element Method is used for discretization and resolution of the equations of equilibrium; the constitutive equations are solved by algorithms of the mathematics programming. The region of admissible generalized stress, in turn, occurs naturally in the approach when the shape of the thermodynamic potential of dissipation is known beforehand. The work shows that it is possible to formulate constitutive models for materials live in the focus of the thermodynamic theory, applying techniques and concepts of well-established convex analysis and optimization. It is shown that for the model in study, the dissipation potential can be obtained from the resolution of an optimization problem by the technique of Lagrange multipliers. The simulations were performed with a program developed in the programming language FORTRAN which could analyze the distribution of stresses, strain, stiffness and density in the bone matrix using a post processing in the software Paraview ® using the open-source scripts VTK (Visualization Tool Kit).

Keywords: Bone remodeling, Generalized thermodynamic potentials, Orthodontic Movement, finite elements, optimization.

1. INTRODUÇÃO

A biomecânica é a área da bioengenharia em que os princípios da mecânica são aplicados aos organismos vivos. Essa abordagem pode ser encarada em múltiplas escalas de estudo, desde a molecular, onde as células e processos bioquímicos são considerados até a escala macroscópica no nível dos tecidos e órgãos.

As referências iniciais relativas à biomecânica remontam à antigüidade clássica e pertencem a Aristóteles, que registrou as primeiras observações sobre o ato de caminhar do homem e dos animais, como consequência da ação dos membros inferiores e patas contra o solo. Com o final da idade média e início do Renascimento outros pesquisadores puderam contribuir para esta área do conhecimento. Galileu Galilei, em 1638, foi um dos primeiros a argumentar que o formato dos ossos estava relacionado com cargas aplicadas (Ascenzi, 1993).

A natureza dessa dependência foi descrita por Wolff (1986), que propôs que toda mudança na forma ou função de um osso vivo é seguida por adaptações de sua estrutura interna e de seu formato externo.

A investigação sobre o domínio do crescimento e remodelação de um tecido qualquer como uma resposta às cargas aplicadas vem sendo estudada por diversos autores. Por exemplo, os efeitos da elevação da pressão arterial sobre a parede das artérias, o comportamento dos cardiomiócitos dentro de um coração em um infarto cardíaco, o crescimento ósseo em resposta ao exercício físico têm sido amplamente considerados como casos em que tecidos vivos sofrem o remodelamento como uma consequência direta das cargas aplicadas (Hong and Barlett, 2008).

Áreas do conhecimento como a química, a biologia molecular e a biologia celular têm muito a oferecer na forma de explicar as propriedades ativas e passivas de tecidos vivos. Por exemplo, em contrações musculares, a ligação da miosina à actina é baseada em uma reação bioquímica envolvendo íons cálcio e ATP (Hong and Barlett, 2008).

O estudo do remodelamento ósseo mostra-se fundamental quando observamos os casos de doenças ósseas relacionadas ao envelhecimento. A Osteoporose representa uma grande preocupação para a saúde pública, que afeta mais de 15 milhões de pacientes nos Estados Unidos e custa um bilhão de dólares por ano em despesas médicas (Rosenberg, 1994). Estima-se que 25% das mulheres com mais de 65 anos podem sofrer uma fratura óssea como resultado da osteoporose (Tohmé et al., 1995). O hormônio PTH foi considerado um causador de perda óssea, no entanto, alguns trabalhos demonstraram que administração intermitente de PTH causa a formação óssea (Dobnig e Turner, 1995).

No estudo dos modelos constitutivos para a remodelação óssea, diversos fenômenos podem ocorrer: o tecido ósseo pode crescer (modelação), modificar a sua forma (remodelação) ou se reparar, quando fraturado. O crescimento ocorre durante a infância, onde

há alteração da forma e do tamanho dos ossos. A remodelação interna ocorre durante toda a vida, onde acontece a renovação da organização estrutural interna do osso, desempenhando importante papel no reparo de microdanos e manutenção da integridade mecânica. Finalmente, a auto-reparação, ou cicatrização, ocorre na presença de alguma fratura. A remodelação é um processo biológico onde fatores hormonais, juntamente com variações da pressão local sobre as membranas celulares ativam ou inibem a formação ou o desaparecimento dos tecidos. (Doblaré, *et al.*, 2004). Costuma-se idealizar uma regra potencial para se determinar computacionalmente o resultado que essa hipótese produz nas estruturas dos tecidos e nas morfologias reais para, na seqüência, compará-las com resultados experimentais realizados “in vivo” e “in vitro”.

Pesquisadores têm comparado os resultados das diversas teorias de diferenciação óssea com resultados de experimentos em animais, mas ainda está longe de se chegar a uma definição de qual é a teoria de mecano-diferenciação e mecano-regulação mais aceita. (Rüberg, 2003). O conhecimento das tensões e deformações em um calo de fratura, ou ao redor de um implante, e sua influência na diferenciação dos tecidos pode conduzir a uma compreensão melhor dos processos mecanicamente controlados de diferenciação dos tecidos. Além disso, podem ajudar a melhorar os tratamentos de fraturas, os tratamentos ortodônticos, os projetos de implantes entre outras aplicações da área da saúde.

O estudo quantitativo do remodelamento ósseo está se intensificando nos últimos anos e tem um grande potencial para se tornar um artifício no auxílio do tratamento de casos clínicos. Os distúrbios da oclusão são casos clínicos muito comuns na ortodontia e um grande número de aparelhos ortodônticos vem sendo aplicados inclusive entre indivíduos adultos.

A oclusão é o ramo da odontologia que estuda as relações de mordida entre a arcada dentária superior e inferior. Essa relação dinâmica, morfológica e funcional envolve os componentes do órgão mastigatório, dos quais, os dentes, as estruturas de suporte dos dentes, o sistema neuromuscular, as articulações temporomandibulares e o esqueleto crâniofacial o constituem. Os movimentos mandibulares são coordenados e diretamente ligados ao sistema neurológico, o que explica o deslocamento mandibular para um dos lados e mudança do eixo do corpo, em decorrência de interferências oclusais e contatos prematuros, por exemplo. Essas condições podem provocar tensão, fadiga, hiperatividade, espasmos e dor nos músculos da mastigação e nos posturais da cabeça e pescoço enquanto a alteração oclusal não for corrigida. Esses fatos mostram a importância da oclusão para o sucesso dos tratamentos restauradores e/ou reabilitadores de reprodução dos movimentos mandibulares. Uma das consequências dos distúrbios resultantes de uma má oclusão é o aparecimento de trauma do periodonto, que apresenta maior capacidade de deformação, e de distúrbios da articulação temporomandibular, que podem mesmo chegar a patologias graves da mesma. Outra consequência indesejada é a reabsorção parcial de raízes dentárias (Cattaneo, *et al* 2005).

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivos Gerais

Desenvolver um modelo numérico-computacional que permita simular o comportamento constitutivo do osso a partir de potenciais termodinâmicos com o auxílio da análise convexa.

1.1.2. Objetivos Específicos

- a) Aplicar a teoria da termodinâmica com variáveis internas e técnicas da análise convexa à modelagem do comportamento mecânico dos ossos;
- b) Programar um algoritmo adequado à resolução da equação constitutiva;
- c) Programar um algoritmo adequado à resolução do problema de equilíbrio global;
- d) Aplicar o método dos Elementos Finitos à discretização espacial do problema de valor de contorno nos exemplos propostos;
- e) Realizar simulações que descrevam comportamentos reais com o programa desenvolvido;

1.2. Estrutura do Trabalho

O presente trabalho está dividido em nove capítulos, o capítulo 1 apresenta a introdução com os objetivos gerais e específicos do trabalho.

A revisão bibliográfica é apresentada no segundo capítulo, onde a matriz óssea é conceituada e definida em função de suas propriedades de estrutura, composição e mineralização. Em seguida é feita uma revisão sobre as características mecânicas e experimentais do osso e sobre a danificação que ocorre no processo de remodelamento ósseo.

No capítulo 3 é apresentada a segunda lei da termodinâmica, a lei de dissipação e a energia livre utilizada no trabalho. São discutidas as variáveis de estado, variáveis internas externas que atuam no mecanismo de remodelamento ósseo.

A formulação variacional em taxas e incrementos finitos é apresentada no capítulo 4 e os algoritmos utilizados para resolver a formulação em incrementos estão descritos no capítulo 5. Os métodos numéricos estão apresentados no capítulo 5: o Método dos Elementos Finitos, o Método de Quase-Newton e o Método de Newton-Raphson.

O capítulo 6 é dedicado à modelagem de três exemplos: um unidimensional e dois bidimensionais, representando um corpo de prova, uma trabécula e uma aplicação na ortodontia, respectivamente. A apresentação dos resultados desses exemplos é feita no capítulo 7 onde também é feita uma discussão sobre a teoria e os resultados obtidos.

A conclusão, discussão dos resultados e as sugestões futuras são descritas no capítulo 8 e, por fim, no capítulo 9 encontram-se as referências bibliográficas.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O tecido ósseo é um material vivo que tem a função de formar o esqueleto e conseqüentemente proporcionar locomoção e proteção ao organismo. Ele é sujeito a carregamentos permanentes e transientes causados por atividades diárias e eventualmente a carregamentos extremos como conseqüência de acidentes. Ao contrário dos materiais inertes esses tecidos são capazes de responder e se adaptar ao seu ambiente. O crescimento ósseo e a cura de uma fratura são processos de caráter temporário, já a estrutura interna dos ossos é mantida e adaptada por um processo denominado remodelação óssea (Rüberg, 2003).

Esse processo é responsável pela remoção do micro-dano e conseqüentemente pelo aumento da vida útil de um tecido ósseo. Além disso, a adaptação estrutural a mudanças no ambiente mecânico desempenha um papel importante no contexto de implantes e próteses. Devido ao enorme impacto social causado por doenças como a osteoporose e à falha dos implantes e das próteses, avanços no entendimento teórico e na simulação computacional da remodelação óssea são de grande importância.

Embora os primeiros modelos fossem capazes de predizer boas aproximações do comportamento real de um osso, uma abordagem quantitativa era impossível e muitos aspectos biológicos foram negligenciados. Recentemente, muitos modelos têm sido publicados levando em consideração aspectos da microestrutura e das atividades celulares (Rüberg, 2003).

2.1. Tecido Ósseo

Em geral os formatos dos ossos podem ser classificados em três grupos: curtos, chatos e longos. Os ossos curtos (por exemplo, o calcâneo no calcanhar) têm extensões similares em todas as dimensões, os ossos chatos (crânio, ombros) têm uma dimensão muito menor do que as outras duas e ossos longos (fêmur, tíbia, ulna) têm uma dimensão muito maior do que as outras duas. Ossos longos têm função mais estrutural enquanto que os ossos chatos têm como objetivo principal a proteção. Adicionalmente existem ossos irregulares que não fazem parte destas classes e um exemplo típico de ossos irregulares são as vértebras na espinha. A ilustração da Figura 2 mostra o esqueleto humano e alguns exemplos de cada tipo de osso. Um osso longo pode ser dividido em três partes como mostra a Figura 1: epífise, metáfise e diáfise.

De um ponto de vista mais microscópico existem dois tipos de tecido ósseo: trabecular e cortical, facilmente distinguidos pelo seu grau de porosidade. Os tecidos ósseos dos dois tipos são envoltos pela medula, que é a fonte de células ósseas e contém vasos sanguíneos e nervos. A medula óssea, que, em parte é amarela, funciona como depósito de lipídeos, e, no restante, é vermelha e gelatinosa, constituindo o local de formação das células do sangue, ou seja, de hematopoiese. O tecido hemopoiético é popularmente conhecido por "tutano". As maiores quantidades de tecido hematopoético estão nos ossos da bacia e no esterno. Nos ossos longos, a medula óssea vermelha é encontrada principalmente nas epífises. A medula não será considerada de agora em diante pois se admite que ela não tenha influência direta no comportamento mecânico do osso para o estudo desta dissertação (Rüberg, 2003).

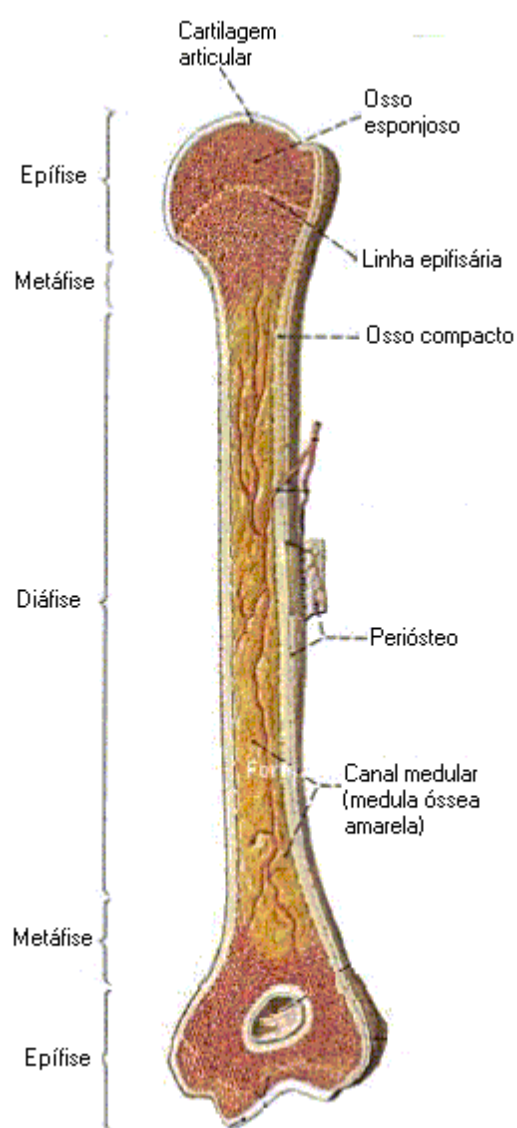


Figura 1– Corte longitudinal de um osso longo.
(Avancini & Favaretto)

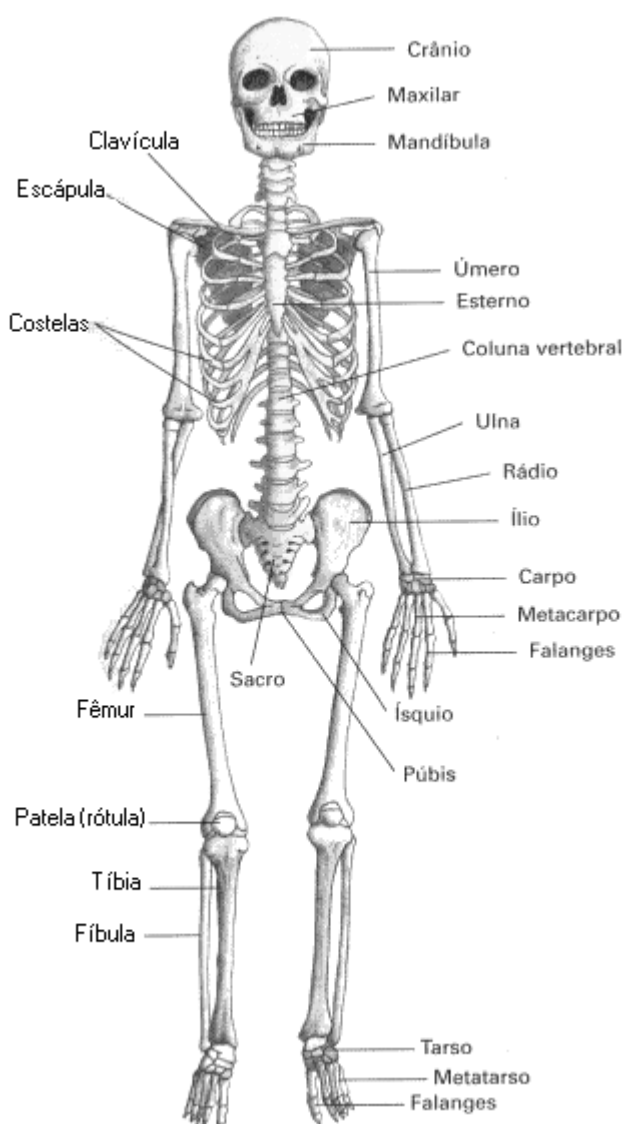


Figura 2 – Ossos do Corpo Humano.
(Avancini & Favaretto)

A seguir serão apresentados alguns conceitos importantes no desenvolvimento de uma teoria para o estudo do remodelamento ósseo.

O volume do osso pode ser dividido em duas partes.

$$V_T = V_B + V_V \quad (2.1)$$

Onde os índices T , B , V referem-se ao volume total, volume do tecido ósseo e o volume de vazios, respectivamente. Há diferença entre osso, que corresponde ao volume total V_T , e tecido ósseo, que não contém a medula e vazios. Com a definição das partes do volume é possível definir porosidade.

$$p = \frac{V_V}{V_T} = 1 - \frac{V_B}{V_T} \quad (2.2)$$

Outra quantidade importante é a densidade aparente ρ descrita por:

$$\rho = \frac{m_T}{V_T} = \frac{m_B + m_V}{V_T} \quad (2.3)$$

sendo m_T é a massa óssea total, m_B é a massa de matriz óssea e m_V é a massa de fluidos. A porosidade, por sua vez, é definida de acordo com a densidade:

$$p = 1 - \frac{\rho}{\rho_t} \quad (2.4)$$

onde $\rho_t = m_B / V_B$ se refere à densidade do tecido de uma espécime imaginária de osso com porosidade nula. Esta quantidade geralmente é considerada por um valor constante de 2.0 g/cm³, porém, se for considerada a mineralização, a densidade do tecido ósseo se torna variável. O quociente V_B / V_T é referenciado como a fração de volume óssea e tem grande importância para as propriedades mecânicas do osso.

Com estas considerações, os tecidos ósseos podem ser classificados. O osso trabecular (também chamado de osso esponjoso) é uma estrutura muito porosa achada em ossos curtos e chatos assim como no final de ossos longos. Sua alta porosidade varia entre 0.75 e 0.95. Os poros são interconectados e preenchidos pela medula, a matriz mineralizada é composta por uma estrutura em placas formando as trabéculas que têm espessura de aproximadamente

200 μm (Rüberg, 2003). Na Figura 3 e na Figura 4 estão representadas fotos de ossos trabecular e cortical.

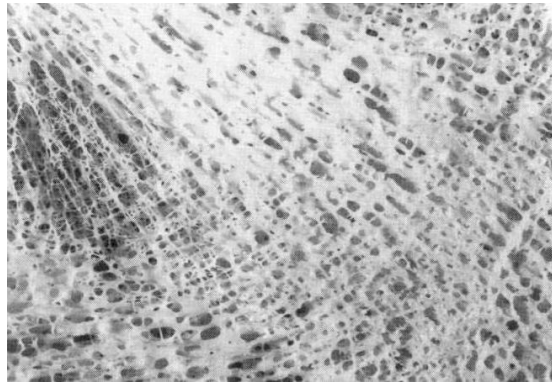


Figura 3 - Foto de um osso trabecular.
(MARTIN et al., 1998 apud Rüberg, 2003)

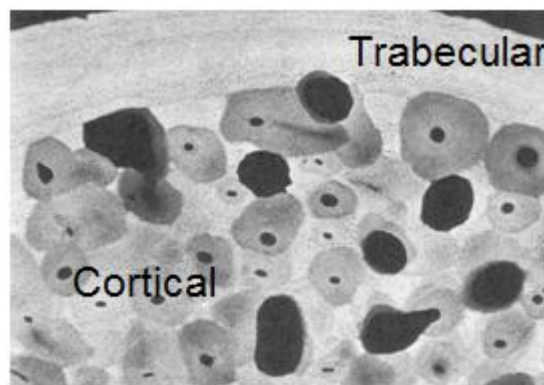


Figura 4 - Fotos dos dois tipos de osso: trabecular e cortical
(MARTIN et al., 1998 apud Rüberg, 2003)

Ao contrário do osso trabecular, o osso cortical (ou compacto) tem uma porosidade muito baixa: entre 0,05 e 0,10. Esse osso, que forma aproximadamente 80% de um esqueleto maduro, pode ser encontrado tanto na cobertura (córtex) em torno do osso trabecular ou como a diáfise dos ossos longos. Os poros no osso cortical são preenchidos por canais haversianos (Figura 6) que contêm capilares e nervos e têm um diâmetro de aproximadamente 50 μm , os canais de Volkmann, que são conexões transversas dos canais haversianos. No osso cortical também existem cavidades de reabsorção, que são espaços temporários de remodelação de diâmetro próximo a 200 μm . Os osteons são células ósseas que estão dispostas em paralelo ao longo eixo do osso cortical.

Na Figura 5 a seção transversal da diáfise de um osso longo é apresentada, o desenho também mostra as diferentes capilaridades de uma seção do osso.

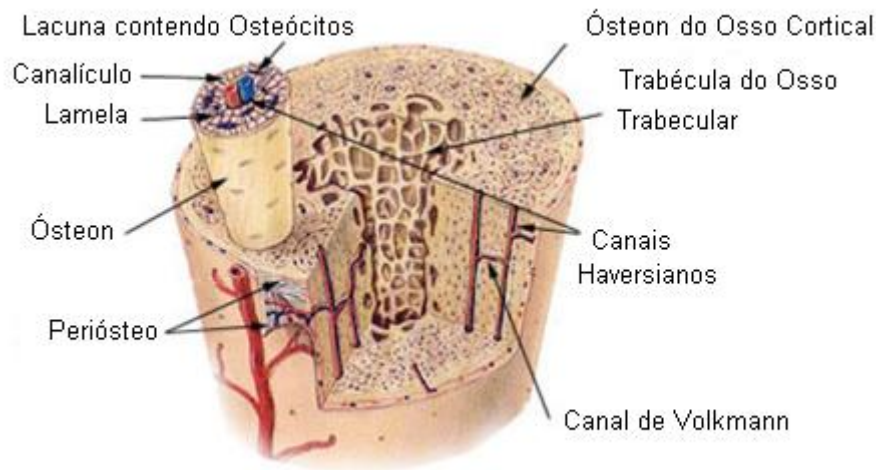


Figura 5 – Osso Cortical e Osso Trabecular. Imagem representando uma seção transversal de um osso longo humano.
Fonte: Robling, et al., 1999.

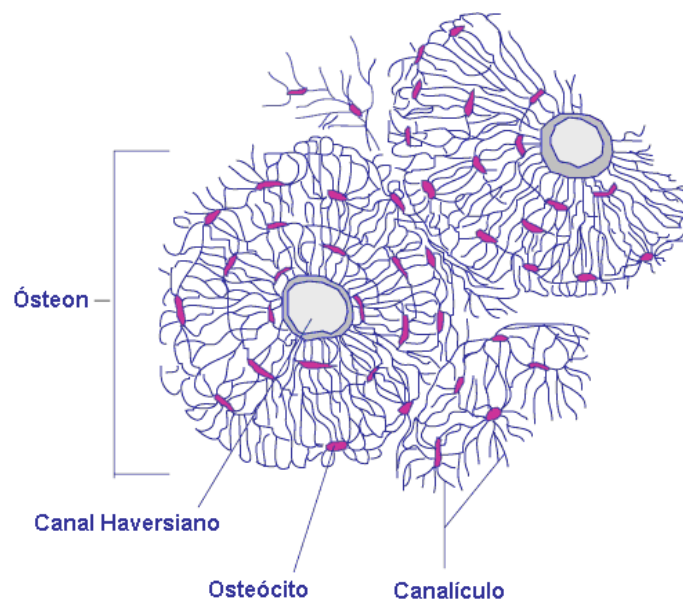


Figura 6 – Ósteon, Osteócito e Canais Haversianos
Fonte: Robling, et al., 1999.

O Canal Haversiano circunda vasos sangüíneos e células nervosas ao longo de todo o osso e se comunica com osteócitos através de canalículos. Este arranjo único interliga as células ósseas aos depósitos de sal mineral e é por onde é feito o seu armazenamento, que permite ao tecido ósseo alterar sua rigidez (Robling, et al., 1999).

Outro constituinte que não é considerado tecido ósseo é o periosteio que cobre a superfície externa de todos os ossos para além das regiões das articulações sinoviais e dos

ligamentos. Ele possui uma parte importante na contribuição do fornecimento de sangue aos ossos e, além disso, contribui para o crescimento ósseo e para a cura das fraturas, tendo maior capacidade de atuação nos ossos das pessoas quando crianças, diminuindo com o envelhecimento. Embora muito fino no esqueleto humano, o periósteo participa da remodelação óssea durante a vida das pessoas. No entanto, é de pequena importância no contexto do comportamento mecânico e não será considerado nesta dissertação.

2.2. Composição do Osso

A matriz ou tecido ósseo consiste de componentes orgânicos e inorgânicos. A parte orgânica (também conhecida como osteóide) é aproximadamente 20% da massa total e contém basicamente colágeno, 65% são compostos de matéria inorgânica ou mineral e a água completa o restante (Buckwalter et al., 1995).

Colágeno é uma proteína que pode se organizar como fibras. Ele fornece à matriz flexibilidade, resistência à tração e local para a instalação de cristais minerais, conforme ilustrado na Figura 7. A parte orgânica que não é composta por colágeno tem muito mais influência na atividade celular do que na questão estrutural.

A fase mineral dá ao osso rigidez, resistência à compressão e serve como um reservatório de íons. Essa característica tem a função de troca de íons entre o esqueleto e o sangue e é importante para o metabolismo do corpo inteiro. No contexto da estrutura mecânica, ele forma junto com a matriz orgânica um material rígido que suporta as forças devido às atividades diárias. Esse constituinte mineral é composto basicamente de cristais de hidroxiapatita de cálcio ($Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$) também conhecida como dalita (Buckwalter et al., 1995). Ele aparece com uma constituição relativamente impura que varia com a idade. Os cristais têm forma parecida com uma haste, com dimensões de 5x5x40 nanômetros. A formação dos cristais inorgânicos acontece devido ao processo de mineralização.

Essa estrutura composta é porosa. Os vazios chamados lacunas são espaços microscópicos conectados por canais que fornecem nutrientes às células ósseas. Um milímetro cúbico de tecido ósseo contém até 15.000 lacunas (Hernandez, 2001 apud Rüberg, 2003). Este tipo de porosidade não será considerada na análise que se seguirá e não deve ser confundido com a porosidade do osso determinada pelo volume de vazios V_v .

Em termos da sua composição, o volume de tecido ósseo V_B pode ser definido como mostra a Equação (2.5).

$$V_B = V_O + V_M + V_A \quad (2.5)$$

sendo os índices O , M e A os constituintes orgânicos, inorgânico ou mineral e a água, respectivamente. Considerando a massa seca de osso m_s igual à soma da massa de constituintes orgânicos e minerais, ou seja, $m_s = m_O + m_M$. O grau de mineralização é igual à divisão entre a massa de minerais e a massa seca, como mostra a Equação (2.6). Um valor típico para o grau de mineralização, g_m , é 0.65 (Martin et al., 1998 apud Rüberg, 2003).

$$g_m = \frac{m_M}{m_s} \quad (2.6)$$

O volume de água não contribui significativamente para o comportamento mecânico do osso, portanto será negligenciado e o volume do tecido ósseo será subdividido como mostra a Equação (2.7).

$$V_B = V_O + V_M \quad (2.7)$$

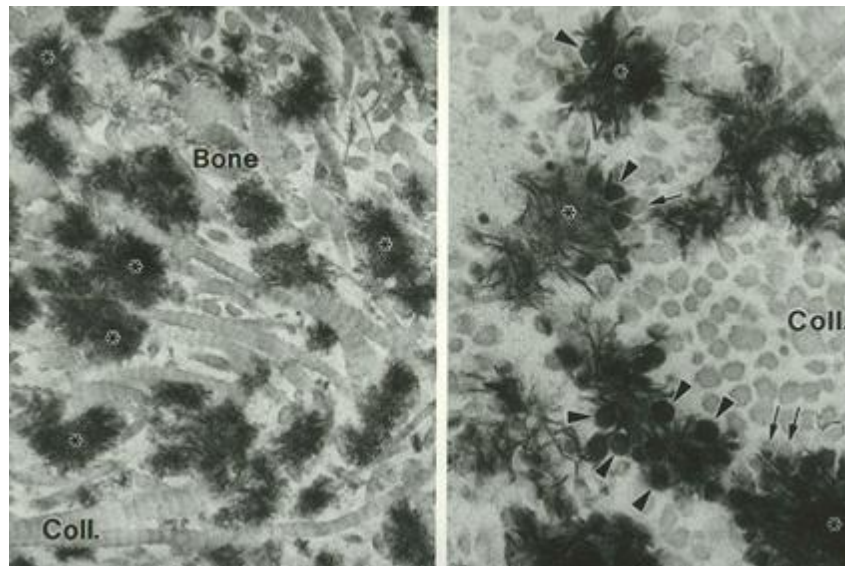


Figura 7 – Fibras de colagénio entre as células ósseas (Simões, 2008).

2.3. Células Ósseas e o Hormônio PTH

Apesar de insignificantes na fração de volume e nas propriedades mecânicas, as células ósseas estão presentes na origem de qualquer tipo de dinâmica óssea. Existem dois tipos de células ósseas, as pertencentes ao conjunto de células tronco mesenquimais e as pertencentes ao conjunto de células tronco hematopoiéticas.

A linhagem celular mesenquimal tem a ordem: preosteoblasto, osteoblasto e osteócito ou célula óssea viva. Todos esses membros têm um único núcleo. Células mesenquimais não diferenciadas (chamadas preosteoblastos) são localizadas em canais do osso, na medula ou na periferia. Elas podem aparecer de outras fontes (Buckwalter et al., 1995) e são de formato irregular. Antes de serem estimuladas para migrar, se proliferar e se diferenciar em osteoblastos, elas permanecem no seu estado original.

Seus sucessores, os osteoblastos, surgem de um processo que dura entre 2 e 3 dias. Eles têm um formato cuboidal, e estão bem próximos um ao outro na superfície do tecido. A síntese e a excreção da matriz orgânica é a principal função dessas células e eles excretam a uma taxa de aproximadamente $1\mu m/dia$. Essa velocidade é chamada de taxa de aposição e descreve a pilha diária de osteon que está sendo depositada.

Um grande número de osteoblastos desaparece por um processo desconhecido (Buckwalter et al., 1995) depois de sua vida útil. Mas alguns permanecem no tecido e sobrevivem como osteócitos, o tipo de célula óssea que compõe cerca de 90% das células ósseas humanas. Eles estão envoltos por osteóides e formam parte da rede celular. Os seus relativos mais próximos, que vivem nas superfícies mais externas do tecido, são a linhagem celular chamada de osteócitos de superfície. Essas células funcionam na iniciação da reabsorção óssea, que é o propósito dos membros de outra linhagem celular.

O primeiro passo no processo de reabsorção pode ser a atividade da linhagem celular que, quando estimulada, remove a fina camada de osteóides que cobre a matriz mineral. Adicionalmente, a rede de células da linhagem mesenquimal é assumida a sentir deformações e fluxos potenciais de sangue e desse modo controlar a dinâmica do osso (Rüberg, 2003).

Monócitos e osteoclastos são dependentes da linhagem celular hematopoiética. Monócitos mononucleares podem ser estimulados para se diferenciar em células precursoras que formam os osteoclastos multinucleares pela fusão. A fim de cumprir sua função de células de reabsorção óssea, elas ligam-se a superfície do osso e secretam um ácido que desmineraliza a matriz inorgânica. Além disso, eles produzem algumas enzimas que

dissolvem o colágeno orgânico. Isto é geralmente feito em uma velocidade chamada taxa de reabsorção que tem magnitude maior que a taxa de aposição. Terminando sua atividade, eles se dividem em células mononucleares que podem ser reativadas (Rüberg, 2003). A Figura 8 mostra ilustrações das células ósseas.

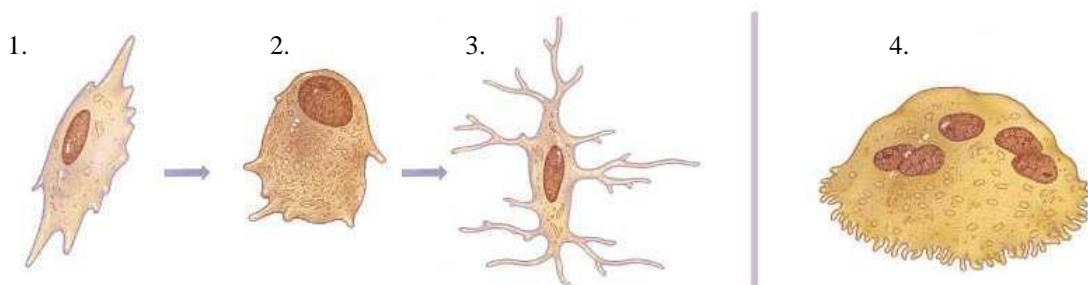


Figura 8 – Células Ósseas (Simões, 2008).

1. Célula osteogênica (desenvolve-se num osteoblasto)
2. Osteócito (mantém o tecido ósseo)
3. Osteoblasto (forma o tecido ósseo)
4. Osteoclasto (reabsorve e destrói o tecido ósseo)

O Osso, maior reservatório de cálcio do corpo, está sempre sobre regulação hormonal do hormônio PTH. O hormônio da paratireóide (PTH ou paratormônio) é um hormônio secretado pelas glândulas paratireóideas. Ele atua aumentando a concentração de cálcio no sangue, ao passo que a calcitonina (um hormônio produzido pela glândula tireóide) atua diminuindo a concentração de cálcio. O paratormônio estimula a atividade osteolítica (destruidora do cristal apatite do osso), aumenta a absorção renal e intestinal de cálcio e aumenta a absorção de vitamina D (Kroll, 2000).

A regulação da glândula paratireóide é autônoma. São as próprias células da paratireóide que analisam a concentração de íon cálcio no sangue que as irriga e respondem aumentando (se é baixa) ou diminuindo (se é alta) a síntese e liberação de paratormona, de forma a manter a homeostasia do cálcio contribuindo para a homeostase óssea. A Figura 9 mostra uma ilustração da localização das glândulas da tireóide e da paratireóide.

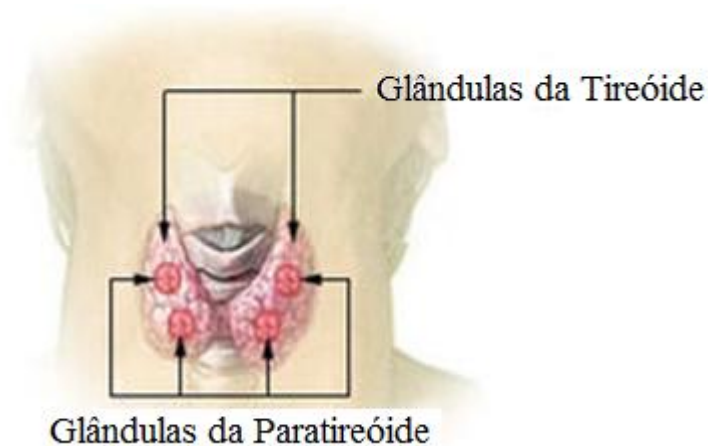


Figura 9 – Glândulas da Paratireóide. Dois pares de glândulas endócrinas que se situam embebidas na glândula tireóide.

O PTH estimula a proliferação de precursores de preosteoblastos em preosteoblastos e inibe a proliferação de preosteoblastos em osteoblastos. O fator IL6 inibe a proliferação de preosteoblastos em osteoblastos, porém estimula a proliferação de preosteoclastos em osteoclastos. A Interleucina-6 (IL-6) é um fator crítico no controle dos sistemas imune e hematopoiético (Kroll, 2000). Os osteoclastos reabsorvem o osso e liberam cálcio, entretanto eles não possuem receptores do hormônio PTH.

É possível estimar a concentração de células ósseas considerando populações de osteoclastos, osteoblastos e precursores de osteoblastos e respectivas taxas de variação regidas por equações diferenciais ordinárias (Kroll, 2000 e Lemaire, 2004). A razão entre o número de Osteoblastos e Osteoclastos indica o efeito líquido do hormônio PTH na absorção ou deposição óssea (Kroll, 2000).

2.4. Mineralização

O grau de mineralização (também chamado de grau de calcificação) está intrinsecamente ligado ao comportamento mecânico do osso e tem grande influência na rigidez da matriz óssea.

O processo geral é dividido em duas fases: a primeira e a segunda fase de mineralização. Eles podem ser distinguidos pela sua velocidade. A primeira parte acontece dentro de poucas horas até alguns dias e gera em torno de 60% da fase mineral. Os cristais minerais aparecem em zonas vazias separadas pelas fibrilas do colágeno, mas progressivamente ocupam todos os espaços disponíveis. A formação de cristais de cálcio e

fosfato a partir dos íons de cálcio e de fosfato é considerada uma transformação de fase (Buckwalter et al., 1995).

Em seguida, o mineral que foi formado continua lentamente a se acumular. Nesta fase secundária, o intervalo de tempo de alguns anos é apropriado para mensurar as mudanças dependentes do tempo no processo de saturação. Assim, o esqueleto de uma pequena criança é pouco mineralizado, em contraste com um esqueleto mais maduro. Isto explica porque um osso de uma criança é mais flexível e resistente a choques, sendo que um osso de um adulto é menos resistente. Com o tempo o grau de mineralização aumenta a rigidez do osso, porém diminui a flexibilidade.

Considerando que a simulação de remodelamento ósseo pode ser processada em incrementos ao longo dos dias, a fase inicial de mineralização perde seu significado e será desconsiderado para efeito prático. A Equação (2.8) apresenta um modelo razoável para a segunda fase de mineralização.

$$g_m(t) = g_m^{\max} + (g_m^0 - g_m^{\max})e^{-(k_{gm})t} \quad (2.8)$$

O parâmetro k_{gm} determina o formato da curva, g_m^0 representa a mineralização inicial, resultante da primeira fase e g_m^{\max} representa o máximo grau de mineralização (Rüberg, 2003).

2.5. Características Mecânicas e Experimentais do Osso

O tecido ósseo é um material altamente complexo, pois é um tecido vivo que se regenera, tem porosidade, não é homogêneo, é anisotrópico e tem comportamento não linear.

Algumas simplificações devem ser aplicadas para poder simular o comportamento deste tecido de uma maneira aproximada. O osso será considerado como homogêneo, a composição será considerada constante e será considerado como um material contínuo para se poder utilizar o ferramental matemático da Mecânica do Contínuo.

As propriedades elásticas do osso como um material isotrópico linear podem ser descritas por apenas dois parâmetros: o módulo de elasticidade ou de Young E e o coeficiente de Poisson ν . A relação entre a rigidez do material e a densidade aparente ρ , Equação (2.9), é descrita por Martin et al., 1998 apud Rüberg, 2003.

$$E = E(\rho) = k_e \rho^l \quad (2.9)$$

Os parâmetros k_e e l são constantes ajustáveis a dados experimentais.

O modelo de Stanford apresenta uma relação parecida (Doblaré e García, 2002) como mostram a Equação (2.10) para o módulo de elasticidade e a Equação (2.11) para o coeficiente de poisson.

$$E = \begin{cases} 2014\rho^{2.5} & \text{se } \rho \leq 1.2 \text{ g/cm}^3 \\ 1763\rho^{3.2} & \text{se } \rho > 1.2 \text{ g/cm}^3 \end{cases} \quad (2.10)$$

$$\nu = \begin{cases} 0.2 & \text{se } \rho \leq 1.2 \text{ g/cm}^3 \\ 0.32 & \text{se } \rho > 1.2 \text{ g/cm}^3 \end{cases} \quad (2.11)$$

Uma aproximação diferente foi descrita por Hernandez et. al, 2001 levando em consideração o grau de mineralização. A rigidez do material depende da fração de volume do osso V_B/V_T e do grau de mineralização g_m , como mostra a Equação (2.12). Uma aproximação para a tensão última do osso é dada na equação (2.13):

$$E = 84.37 \left(\frac{V_B}{V_T} \right)^{2.58} g_m^{2.74} \quad (2.12)$$

$$\sigma_{ult} = 0.79433 \left(\frac{V_B}{V_T} \right)^{1.92} g_m^{2.58} \quad (2.13)$$

Aplicando estas expressões a um osso cortical totalmente mineralizado ($g_m = 0.7$), fração de volume de 95%, chega-se aos valores $E = 27.82$ GPa e a tensão última $\sigma_{ult} = 286$ MPa. A rigidez encontrada é aproximadamente um décimo da rigidez do aço e a tensão de compressão é próxima à do aço sendo que o peso específico é um quarto em relação ao peso específico do metal. Em outras palavras, o tecido ósseo é muito mais leve e flexível que o aço, porém tem a tensão última da mesma magnitude.

Testes mecânicos uniaxiais de compressão e de tração foram realizados em vértebras humanas (Kopperdahl e Keaveny, 1998), com aplicação de carga do tipo servo-hydraulic, ou seja, dinamicamente em ciclos. As densidades aparentes iniciais dos dois corpos de prova ensaiados são distintas, como mostra a Figura 10.

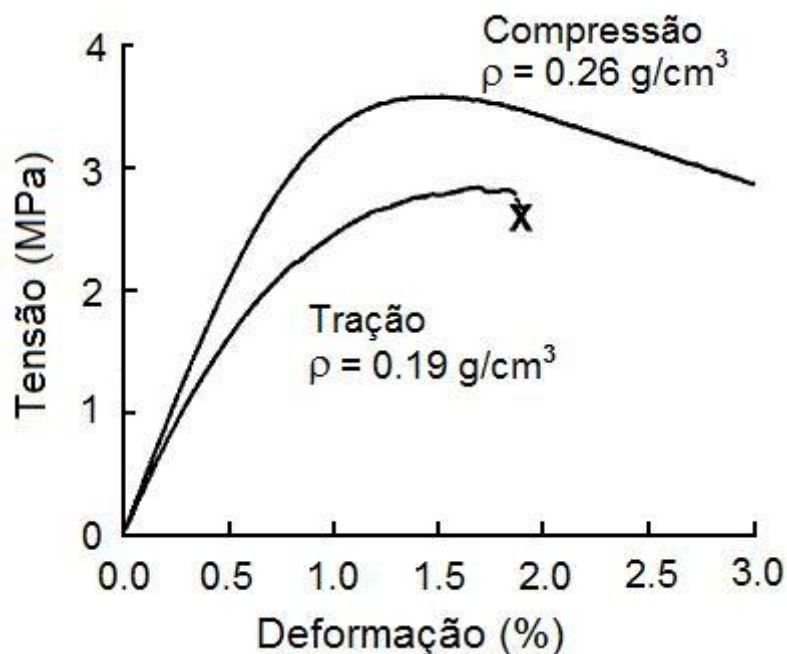


Figura 10 – Diagrama tensão x deformação para duas vértebras humanas com diferentes densidades aparentes iniciais (ρ), (Kopperdahl e Keaveny, 1998).

A espécie óssea com menor densidade aparente submetida à tração apresentou menor módulo de elasticidade e deformação última menor. Os dois diagramas de tensão versus deformação apresentaram comportamento não linear para deformações menores que 1.0 %. Enquanto que a deformação última apresentada pela vértebra de menor densidade foi menor que 2.0 %. O “X” no gráfico indica o ponto onde ocorreu o rompimento do material, que aconteceu apenas para o corpo de prova da espécie da vértebra tracionada. Os corpos de prova possuíam formato cilíndrico com 8 mm de diâmetro e 25 mm de altura como mostra ilustração da Figura 11.

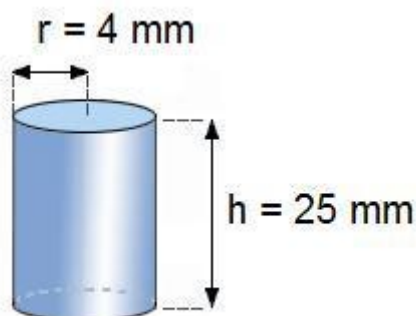


Figura 11 – Ilustração de um corpo de prova ósseo cilíndrico.

2.6. Dano no Osso

O dano na matriz óssea tem um importante papel no início do remodelamento ósseo. O tecido ósseo é um material mais frágil do que dúctil e os efeitos plásticos e viscoelásticos são geralmente desconsiderados nas análises. Como mostrado por Jepsen et al., 2001, o espectro completo de acumulação de microfissuras, escoamento plástico e viscoso (*creep*) existem, porém neste trabalho será considerado apenas o primeiro destes fenômenos inelásticos. Isto é necessário para diminuir o grau de complexidade do problema.

A maneira mais fácil de descrever o processo de danificação é introduzindo uma variável de estado que representa o estado do dano em cada ponto material. Esta variável é então associada com a perda de rigidez seguindo os princípios da mecânica do dano. A relação entre essa variável global (o escalar d no caso isotrópico ou o tensor \mathbf{D} no caso anisotrópico) e os efeitos microscópicos é altamente complexa, no entanto, a variável do dano fornece uma “medida” das microfissuras. Uma fissura influencia localmente no comportamento mecânico do tecido ósseo. No local onde ela ocorreu surgem concentrações de tensões e a possível abertura da fratura pode se propagar em uma direção e comprometer a integridade da estrutura, além de afetar as propriedades materiais globais do osso.

Alguns resultados retirados de Jepsen et al., 2001, mostram que a densidade de fratura varia entre 0 e 760 fissuras/cm² e o comprimento da fissura entre 2 e 88 micrometros. Estes resultados foram retirados de seções do osso humano e variam muito com a idade, gênero ou grupo étnico.

É comum a definição de dano como a perda de rigidez com respeito à tensão uniaxial, como mostra a Equação (2.14).

$$d = 1 - \frac{E}{E_0} \quad (2.14)$$

sendo E_0 o módulo de Young inicial do material sem dano. Esta expressão é consistente para o estado sem danificação, quando $E = E_0$, e para o estado de falha, quando o dano tende à unidade $d \rightarrow 1$ e o módulo de elasticidade tende a zero $E \rightarrow 0$.

A questão é saber como esta variável evolui. E se suas derivadas em relação ao tempo \dot{d} ou em respeito ao número de ciclos $\partial d / \partial N$ são significantes.

O tempo para a falha será denotado por t_f e o correspondente número de ciclos de carga de N_f . Mantendo a deformação ou a tensão constante, a variável de dano pode ser expressa através do tempo normalizado t/t_f ou pelo número de ciclos normalizado N/N_f .

A Figura 12 mostra um gráfico qualitativo da evolução do dano para compressão e tração, dependendo do número de ciclos de carga. A maior diferença é encontrada na fase inicial, onde o dano na tração tem um crescimento mais acelerado. Em seguida, tem-se um período com pouco crescimento do dano até que sua taxa aumente rapidamente.

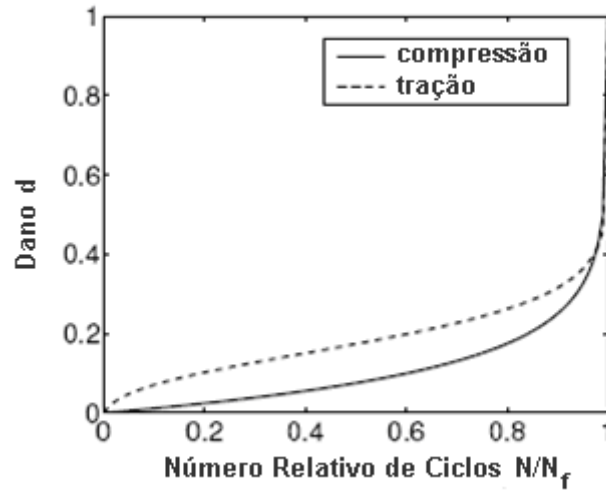


Figura 12 - Evolução qualitativa do dano para compressão (linha contínua) e tração (linha pontilhada) até o momento de fadiga em função do número de ciclos de carga normalizado N/N_f para um nível constante de deformação \mathcal{E} aplicado.

Funções para a este tipo de representação da evolução do dano com o tempo podem ser derivadas facilmente, tais como:

$$d_c = -\frac{1}{C_1} [\ln(1 - C_2 \tilde{\mathcal{E}}^{\delta_1} N)] \quad (2.15)$$

para compressão e:

$$d_t = 1 - c_5 \sqrt{\frac{1}{C_3} \ln(e^{C_3} - C_4 \tilde{\mathcal{E}}^{\delta_2} N)} \quad (2.16)$$

para tração. As relações (2.15) e (2.16) coincidem qualitativamente com os formatos das curvas experimentais, onde a medida de deformação $\tilde{\mathcal{E}}$ é utilizada. As constantes C_1 , C_2 , C_3 ,

C_4 , C_5 , δ_1 e δ_2 são ajustáveis a partir de dados experimentais. Versões destas leis baseadas nos níveis de tensão existem, mas os experimentos são usualmente controlados pela deformação, pois é mais fácil de ser observado.

Regressões lineares e de potência relacionando propriedades mecânicas com a densidade aparente (g/cm^3) para o osso trabecular vertebral humano foram publicadas por Kopperdahl e Keaveny em 1998. O número de corpos de prova ensaiados foi igual a 22 para compressão e 22 para tração, na Tabela 1 as informações são especificadas.

Tabela 1 - Regressões lineares e de potência relacionando propriedades mecânicas com a densidade aparente para o osso trabecular vertebral humano.

| | $E = a + \rho b$ | | | | | | $E = a\rho^b$ | | | | | |
|---------------------------|------------------|------|-------|--------|------|-------|---------------|------|-------|--------|------|-------|
| | Compressão | | | Tração | | | Compressão | | | Tração | | |
| | a | b | r^2 | a | b | r^2 | a | b | r^2 | a | b | r^2 |
| Deformação dano (%) | 0.66 | 1.09 | 0.49 | | | NS | 1.24 | 0.21 | 0.48 | | | NS |
| Deformação última(%) | | NS | | | | NS | | NS | | | | NS |
| Tensão de dano (MPa) | -1.40 | 19.6 | 0.73 | – | 10.1 | 0.51 | 32.6 | 1.60 | 0.70 | 10.0 | 1.04 | 0.51 |
| Tensão última (MPa) | -1.46 | 21.9 | 0.71 | – | 13.2 | 0.47 | 33.2 | 1.53 | 0.68 | 13.3 | 1.07 | 0.47 |
| Módulo (MPa) ^a | – | 2100 | 0.61 | | | | 2350 | 1.20 | 0.60 | | | |

– Indica que o intercepto da regressão linear teve significância baixa;

NS Indica que a regressão não foi significativa;

^a As regressões para o módulo de elasticidade utilizaram n=44 corpos de prova.

Fonte: (Kopperdahl e Keaveny, 1998)

O módulo de elasticidade, a tensão última e a tensão para o início do dano demonstraram correlação positiva com a densidade aparente, como pode se observar pelo coeficiente r^2 . As regressões relacionando o módulo de young e a densidade aparente foram geradas independentemente do estado de tensões ensaiado (tração ou compressão) como pode se observar no caso da regressão linear ilustrada na Figura 13. A Figura 14 ilustra a regressão linear e de potência relacionando a tensão de início do dano com a densidade aparente (Kopperdahl e Keaveny, 1998).

Quando a flambagem domina a compressão axial na trabécula, uma lei de regressão de potência ajusta a curva que relaciona a tensão compressiva de início do dano e a densidade aparente com um expoente 1.6, como ilustrado pelo coeficiente b na compressão da Tabela 1. Na tração, onde não ocorre flambagem, a relação entre a tração axial de início do dano e a densidade aparente é linear (Figura 14).

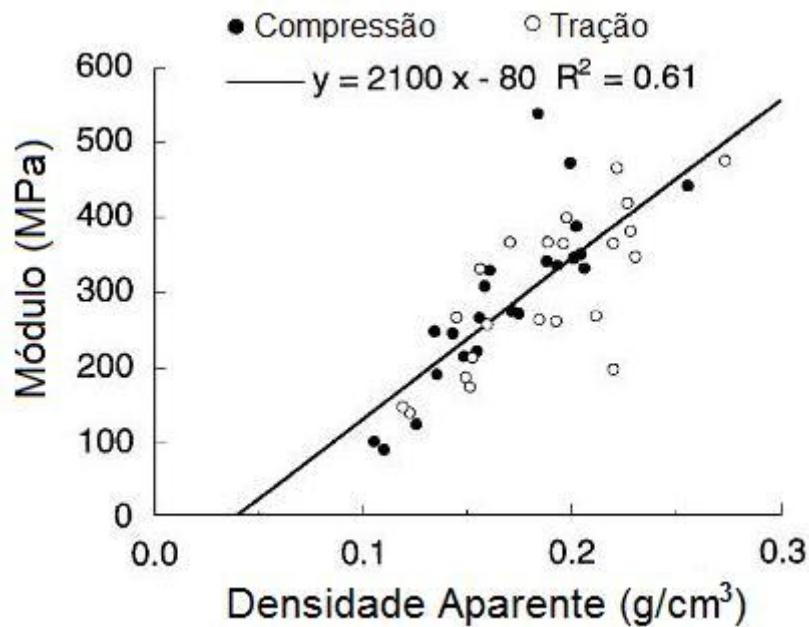


Figura 13 – Módulo de Elasticidade na compressão e na tração em função da densidade aparente e a regressão linear correspondente (Kopperdahl e Keaveny, 1998).

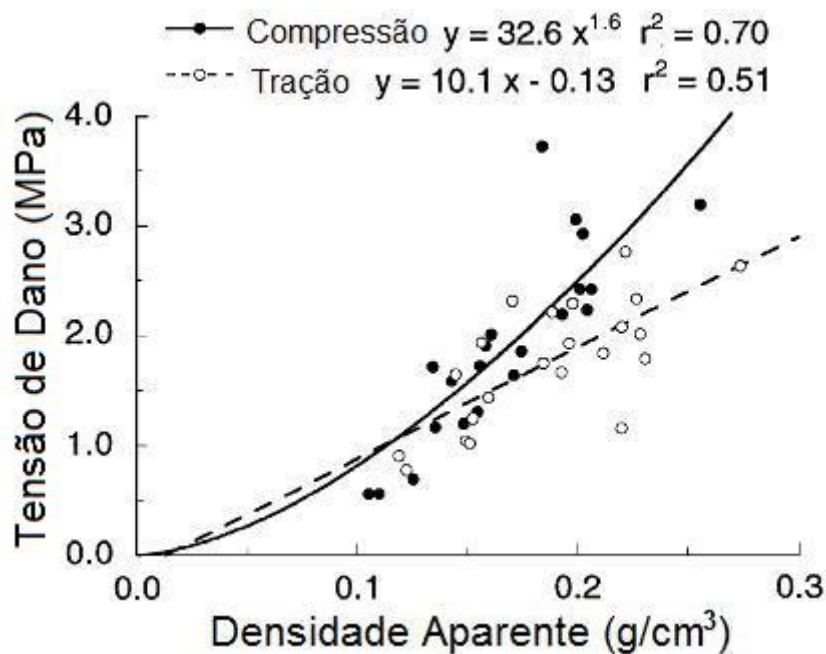


Figura 14 – As tensões de começo do dano na compressão e na tração apresentaram forte correlação com a densidade aparente (Kopperdahl e Keaveny, 1998).

Segundo Kopperdahl e Keaveny (1998), a equação que relaciona linearmente a densidade aparente (g/cm^3) com o módulo de elasticidade (MPa) é definida como:

$$E = 2100\rho \quad (2.17)$$

ou ainda, em termos de potência:

$$E = 2350\rho^{1,2} \quad (2.18)$$

Os valores médios das propriedades obtidas nos ensaios, bem como o desvio padrão dessas propriedades, são mostrados na Tabela 2.

Observa-se na Tabela 2 que, para valores médios, existe uma diferença das propriedades dos ossos na tração e na compressão, o que determina que os dois casos devam ser tratados de forma distinta nos modelos de remodelamento ósseo.

Tabela 2 - Médias e desvios-padrão para as propriedades dos ossos.

| | Compressão (n=22) | Tração (n=22) | p* |
|--|--------------------------|----------------------|-----------|
| Densidade aparente (g/cm³) | 0,17±0,04 | 0,19±0,04 | 0,12 |
| | 0,11-0,26 | 0,12-0,27 | |
| Módulo (MPa) | 291±113 | 301±100 | 0,76 |
| | 90-536 | 139-472 | |
| Deformação de dano (%) | 0,84±0,06 | 0,78±0,04 | 0,0003 |
| | 0,75-0,95 | 0,71-0,88 | |
| Deformação última (%) | 1,45±0,33 | 1,59±0,33 | 0,18 |
| | 0,96-2,30 | 1,09-2,51 | |
| Tensão de dano (MPa) | 1,92±0,84 | 1,75±0,65 | 0,46 |
| | 0,56-3,71 | 0,77-2,75 | |
| Tensão última (MPa) | 2,23±0,95 | 2,23±0,76 | 0,99 |
| | 0,70-4,33 | 1,33-3,53 | |

* p-valores para comparação de grupos de tração versus compressão usando testes t-student.

Fonte: Kopperdahl e Keaveny, 1998

2.7. Biomecânica e o Tratamento Ortodôntico

A compreensão dos fenômenos físicos, químicos e biológicos envolvidos em um tratamento ortodôntico e nos planejamentos e ajustes dos aparelhos ortodônticos permitem um melhor domínio da mecânica aplicada, bem como a minimização dos efeitos colaterais inoportunos, eventualmente produzidos durante o tratamento. O objetivo do tratamento ortodôntico é alcançado através da aplicação de uma carga mecânica de longa duração por um dispositivo (aparelho) ortodôntico. Esse dispositivo gera o movimento ortodôntico que é o resultado final de uma série de eventos biológicos desencadeados pelos estímulos mecânicos (forças) aplicados no tecido ósseo adjacente ao dente. Seu sucesso depende da adoção de uma

estratégia correta, onde diversos fatores estão envolvidos. Os movimentos ortodônticos dos dentes podem ser induzidos por diferentes sistemas de forças pois diferentes tipos de movimentos dentários são produzidos como consequência do nível da direção e da duração da força aplicada. Essas forças, de pequena magnitude, da ordem de 10 a 120cN, ou seja, 0.1 a 1.2N, (Proffit & Fields, 2000) são aplicadas nas coroas dos dentes e transferidas para o osso alveolar pelo ligamento periodontal (LPD). O deslocamento inicial do dente decorre da resposta instantânea ao carregamento aplicado que produz um giro do dente no alvéolo e está diretamente relacionada às propriedades materiais das diferentes estruturas envolvidas. Esse giro produz tensões e deformações que são distribuídas na região óssea ao seu redor. Nessas condições, em geral, a deformação do osso alveolar é reversível e de magnitude muito baixa. Se essa deformação for mantida por um tempo muito grande, as tensões e deformações que se produzem na região óssea adjacente ao alvéolo ativam processos de remodelação óssea, que resultam numa alteração permanente da posição do dente.

O movimento do dente acontece em relação a certos eixos e alguns conceitos devem ser revisados, para melhor entendimento da mecânica ortodôntica:

O Centro de massa pode ser definido como o ponto onde se "concentra" a massa de um corpo livre no espaço. A aplicação de uma força no centro de massa de um corpo de qualquer dimensão faz com que todos os pontos desse objeto se desloquem numa mesma direção e magnitude, constituindo o movimento de translação. Uma força aplicada fora deste ponto geraria no objeto um movimento de inclinação.

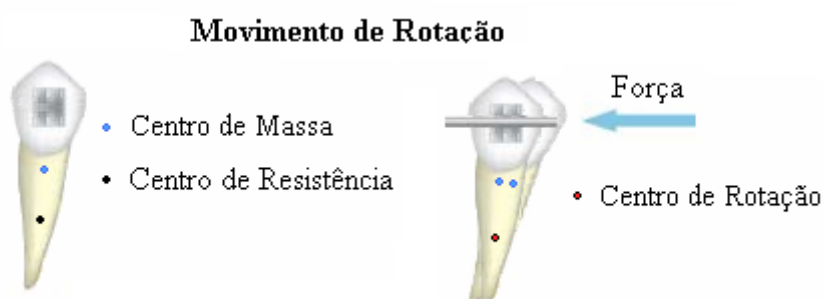


Figura 15 - Esquema mostrando a rotação de um dente.

Centro de resistência (*CRes*): o dente, por sua vez, não está livre no espaço, a sua raiz é circundada pelas estruturas de sustentação do periodonto. Nesse caso, existe um ponto que é denominado centro de resistência. Uma força simples, atuando no centro de resistência do dente, produz um efeito de translação deste dente. O centro de resistência de um dente unirradicular está posicionado no terço coronal da raiz, que pode ser obtido multiplicando-se

por 0.33 a distância entre a crista óssea e o ápice da raiz. Num dente multirradicular, o centro de resistência está localizado próximo à bifurcação ou trifurcação deste (Meireles e Ursi, 2007).

Centro de rotação (*CRot*): quando uma força é aplicada fora do centro de resistência do dente, este sofre um movimento que pode ser definido como uma combinação de translação e rotação. A tendência de rotação está associada ao momento da força (MF) que é obtido por meio do produto da magnitude da força pela distância perpendicular entre a linha de ação de força e o centro de resistência. Sua magnitude pode ser expressa em N x m. A sua representação esquemática é dada pela continuação da linha de ação de força em torno do *CRes*. A aplicação de uma força na coroa gera um movimento que leva o ápice radicular numa direção e a porção cervical da raiz e a coroa para a direção oposta, com um giro ao redor do centro de rotação, que não se movimenta em qualquer direção como mostra a Figura 15 (Meireles e Ursi, 2007).

Binários são duas forças de mesma magnitude e direção, em sentidos opostos, não colineares. O binário é o único sistema de forças que pode causar o movimento de rotação pura de um corpo. Qualquer força simples aplicada fora do *CRes* resulta num movimento de deslocamento do *CRes* no sentido da linha de ação da força, enquanto o dente gira em torno do seu *CRot* que, nesse caso, não coincide com o *CRes*. Por outro lado, quando um binário é aplicado, a movimentação do *CRes* em qualquer um dos sentidos é coibida pela força oposta. Assim, o *CRes* não se movimenta. As duas forças do binário tendem a girar o dente em torno do *CRes*, fazendo que este coincida com o *CRot*. Mesmo quando as linhas de ação de força não são equidistantes do *CRes*, ainda produzem a mesma tendência de rotação do dente. Um binário pode ser aplicado no braquete com o uso de fios retangulares, gerando um torque com a mesma tendência de rotação no dente (Meireles e Ursi, 2007).

A associação de uma força mais um momento atuando no *CRes* pode proporcionar a obtenção dos movimentos ortodônticos desejados. Ou seja, em linguagem ortodôntica, diz-se que é a relação entre o momento e a força (M/F) no *CRes* que regulamenta o tipo de estímulo desejado sobre o ligamento periodontal e a superfície radicular (Meireles e Ursi, 2007).

A movimentação de um dente ocorre em função de diversos fenômenos biológicos que acontecem no osso circunvizinho ao dente, executados por células ósseas que governam o remodelamento do osso esponjoso. As células ósseas são capazes de “sentir” e responder a cargas externas, utilizando-se dos processos de mecanorrecepção e mecanotransdução. O primeiro transmite o estímulo físico extracelular numa célula receptora, enquanto que o segundo transforma o conteúdo do estímulo e/ou da informação num sinal intracelular. Como

consequência, quando o somatório das cargas estáticas e dinâmicas, que são continuamente aplicadas aos tecidos ósseos adjacentes aos dentes, extrapolam valores limites, ocorre a resposta celular pela tríade de processos de adaptação celular óssea (reabsorção, deposição e manutenção) (Turner & Pavalko, 1998).

As células ósseas responsáveis pelo remodelamento do osso trabecular são os osteoclastos e osteoblastos. Osteoclastos caminham sobre a superfície das trabéculas reabsorvendo tecido e formando uma cavidade de reabsorção por onde os osteoblastos passam preenchendo a cavidade com novo tecido (Parfitt, 1984 apud McNamara e Prendergast 2007). Os mecanismos regulatórios que governam a ação das tensões sobre os osteoclastos e osteoblastos não são completamente entendidos; porém, estima-se que osteócitos com mecanorrecepção e mecanotransdução são capazes de informar às células responsáveis pelo remodelamento as variações do estímulo mecânico externo (Burger and Klein-Nulend, 1999). Várias hipóteses foram elaboradas para determinar qual é o estímulo mecânico (fluxo de sangue, deformações da matriz óssea ou dano na matriz óssea) que causam a resposta de células mecanosensitivas.

Diversas são as teorias que tentam explicar os processos de adaptação óssea e muitas delas são conflitantes. Além disso, existe uma grande controvérsia entre a literatura ortodôntica e a literatura ortopédica nesse sentido. É comum encontrarmos nos textos acadêmicos da ortodontia a afirmação de que esforços de compressão causam a reabsorção óssea (atividade celular osteoclática) e que esforços de tração causam formação óssea (atividade celular osteoblástica) enquanto os textos acadêmicos da ortopedia indicam que os esforços de compressão causam formação óssea (Melsen et al 2001). Ainda na década de 60, Epker & Frost (1965) demonstraram a formação óssea na área de compressão. A Figura 16, transcrita do artigo de Epker & Frost (1965) esquematiza três situações: (a) uma vista frontal de um osso longo fraturado que se curou com uma angulação de tal maneira que apresenta uma concavidade em sua superfície na região **F**. Nessa região, constata-se formação óssea (ganho líquido de osso) associada a esforços de compressão resultantes da aplicação de forças conseqüentes do peso e dos músculos; (b) uma vista da secção transversal de um dente inserido no alvéolo quando submetido a uma compressão lateral da esquerda para direita devido à ação de dispositivos ortodônticos. Em consequência disso, o lado direito do dente (região **R**) está submetido a uma força de compressão. Esse é normalmente o local da reabsorção óssea e da perda líquida do osso; (c) uma vista lateral de um pé a caminhar mostra a região do calcâneo (superfície plantar, isto é, do fundo) submetida a forças grandes e freqüentes de compressão. Normalmente, essa situação não é acompanhada pelo ganho

líquido e pela perda óssea. Finalmente, uma quarta situação também é descrita e analisada: os dentes são comprimidos diariamente no alvéolo pelas forças mastigatórias sem no entanto apresentarem absorção óssea.

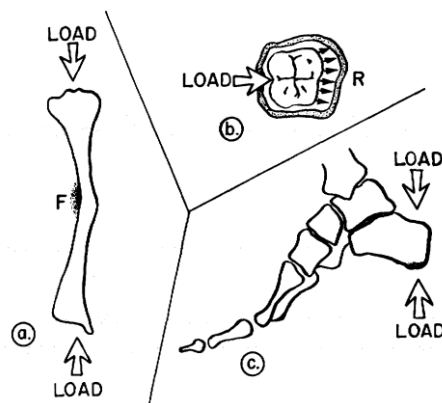


Figura 16 – Esquema de (a) um osso longo fraturado que curvou de maneira curvada submetido a carregamento devido ao peso, (b) um dente carregado lateralmente, (c), um pé ao caminhar, destacando a região do calcâneo. (Fonte: Epker & Frost, 1965).

Nessas quatro situações, o osso é carregado na compressão, mas analisando-o do ponto de vista celular, responde de forma diferente e de maneira oposta às solicitações. Assim é paradoxal acreditar que as forças da compressão causam somente a reabsorção óssea, ou somente a formação óssea.

Algumas teorias foram propostas, na literatura ortodôntica, para tentar explicar as reações do tecido adjacente ao dente, relacionadas às tensões e deformações internas geradas pela aplicação do carregamento externo. Dentre essas se podem citar as teorias da "compressão-tração" (Schwartz, 1932; Reitan, 1951) e da "distorção ou flexionamento do osso alveolar" (Baumrind, 1969; Heller e Nanda, 1979 *apud* Meikle, 2006). Uma terceira teoria foi proposta por Melsen (2001), sugerindo que a formação óssea como reação às cargas ortodônticas poderia ser induzida (1) pela carga exercida por fibras esticadas do ligamento periodontal, que pode também induzir uma pequena flexão da parede alveolar; (2) absorção direta pelo descarregando da parede alveolar no caso de forças com intensidade baixa; e (3) a reabsorção indireta como reparação devido à isquemia que segue à aplicação de forças elevadas (Cattaneo *et al.*, 2005).

No entanto, ultimamente, existe um consenso em torno da idéia de que a remodelação óssea não é só um processo de adaptação ao carregamento externo imposto, mas também a consequência de um processo de remoção do dano (Verna *et al.*, 2004). O microdano que ocorre na estrutura óssea foi descrito inicialmente por Frost (1960). Mais recentemente,

Martin & Burr (1982), Prendergast & Taylor (1994) e Martin (2003) propuseram que o microdano é o principal estímulo que ativa o processo de reparação óssea. Outros autores (Doblaré *et al.*, 2004) propõem que a evolução das variáveis (por exemplo, porosidade e anisotropia da microestrutura óssea) e sua incidência na modificação dos parâmetros constitutivos elásticos seja formulada, utilizando os princípios da Teoria do Dano.

Outro constituinte que não é considerado tecido ósseo é o periósteo, tecido que cobre a superfície externa de todos os ossos para além das regiões das articulações sinoviais e dos ligamentos. Ele possui uma parte importante na contribuição do fornecimento de sangue aos ossos e, além disso, contribui para o crescimento ósseo e para a cura das fraturas, tendo maior capacidade de atuação nos ossos das pessoas quando crianças, diminuindo com o envelhecimento. Embora muito fino no esqueleto humano, o periósteo participa da remodelação óssea durante a vida das pessoas. No entanto, é de importância insignificante no contexto do comportamento mecânico e deixarão de ser considerados nesta dissertação.

Rumo a uma escala ainda mais fina de observação, podem-se encontrar dois grandes tipos de tecido ósseo, não importando se é osso trabecular ou cortical. O primeiro, osso lamelar ou secundário, é uma estrutura altamente organizada que consiste, como o nome sugere, em lamelas e pode ser estruturada em duas diferentes configurações. Existem orientações ortogonais e helicoidais das fibras. As duas são apresentadas no osso humano. Devido à sua estrutura, osso lamelar tem uma resistência relativamente alta, mas precisa de tempo significativo para ser construído (Rüberg, 2003).

Muito mais fraca, porém mais rápidos de serem construídos, são os ossos do segundo tipo, o osso primário. Sua organização pode ser considerada randômica. Este tecido tem grande importância na cura de fraturas, pois pode rapidamente conectar duas partes separadas. Ele forma o esqueleto de um embrião e raramente está presente no esqueleto humano após os primeiros anos de vida (Rüberg, 2003).

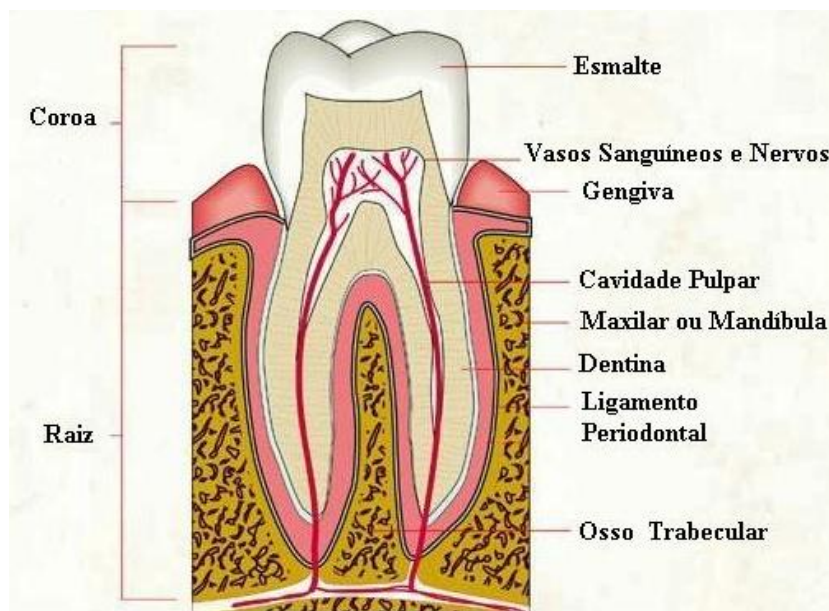


Figura 17 – Representação da seção transversal de um dente.

A Figura 17 apresenta uma representação das partes de um dente e do seu entorno. O interesse deste trabalho está no remodelamento do osso trabecular que absorve as tensões transmitidas da dentina para o ligamento periodontal e conseqüentemente para o osso trabecular.

3. REMODELAMENTO ÓSSEO E POTENCIAIS TERMODINÂMICOS

O estudo da remodelação óssea na teoria da mecânica do contínuo envolve o desenvolvimento de equações constitutivas que relacionam as variáveis de tensões e deformações ao longo do tempo. Um requisito básico de todos os modelos é que eles devem satisfazer as leis da física. Uma equação descrevendo as propriedades de materiais isotrópicos pode ser expressa em termos dos invariantes de tensão e deformação e pode ser discretizada em incrementos finitos. A segunda lei da termodinâmica, que governa o comportamento dissipativo dos materiais, deve ser obedecida. Na maioria dos casos da construção de uma teoria esse requisito é aplicado após o desenvolvimento teórico, quando primeiro as leis constitutivas são propostas e então são aplicadas restrições termodinâmicas. Existem duas desvantagens nessa aproximação: as restrições adicionadas podem limitar o comportamento do modelo e as restrições podem não restringir o modelo adequadamente, levando a resultados não físicos. Uma aproximação termodinâmica pode ser usada para se desenvolver modelos constitutivos. Nessa aproximação, o comportamento do material é descrito em termos de dois potenciais termodinâmicos: um potencial de energia e um potencial de dissipação.

3.1. Segunda Lei da Termodinâmica, Dissipação e Energia Livre

A Segunda Lei da Termodinâmica pode ser expressa por:

$$\frac{dS}{dt} \geq \frac{Q}{\theta} \quad (3.1)$$

sendo S a entropia, t o tempo, Q o calor e θ a temperatura absoluta do sistema. A entropia é uma forma de energia que não pode ser transformada em trabalho, ou seja, o sistema não pode transformar entropia em energia utilizável. O sistema pode somente “produzir” entropia dissipando energia livre (utilizável). A desigualdade de (3.1) decorre desse fenômeno interno dissipativo e pode ser reescrita como:

$$\theta \frac{dS}{dt} \geq Q + \varphi \quad \text{onde } \varphi \geq 0 \text{ sempre.} \quad (3.2)$$

O termo φ representa a dissipação de energia atribuída ao dano (perda óssea) e ao processo de ganho de rigidez (ganho ósseo). A forma de dissipação para sistemas fechados (desigualdade de *Clausius-Duhem*) pode ser escrita como:

$$\varphi = \sigma : \dot{\varepsilon} - S\dot{\theta} - \dot{\Psi} \geq 0 \quad (3.3)$$

Na expressão anterior σ representa o tensor das tensões macroscópicas relacionado com o equilíbrio de forças externas, ε o tensor de deformações totais (observáveis), o sinal “:” representa o produto escalar entre tensores e Ψ representa a energia livre (*Helmholtz*) unitária associada ao sistema, que define os estados energéticos em termos das variáveis de estado externas e internas. O ponto sobre as variáveis indica a derivada temporal da variável respectiva.

3.2. Variáveis de Estado

A partir da definição de um potencial generalizado, o estado termodinâmico de um determinado meio contínuo em um dado ponto e instante está completamente definido pelo conhecimento de um número de variáveis naquele instante, dependentes da posição onde são consideradas. Com essa metodologia é possível descrever fenômenos físicos com um bom grau de precisão, o que irá depender da escolha da natureza e do número de variáveis de estado. O processo definido por esse caminho será admissível se, em cada instante da evolução do material, a desigualdade de *Clausius-Duheim* for satisfeita. As variáveis de estado, também chamadas variáveis termodinâmicas, podem ser variáveis externas (observáveis macroscopicamente) e variáveis internas.

3.3. Variáveis Externas

A temperatura θ e a deformação total ε são algumas das variáveis externas empregadas para fenômenos embasados nas teorias da elasticidade, viscoelasticidade, plasticidade, viscoplasticidade, dano, ganho de rigidez, fratura e *healing* (cura de uma fratura). Para fenômenos reversíveis (elásticos) o estado do material a cada instante de tempo depende unicamente dessas variáveis. No caso da remodelação óssea estudada neste trabalho os efeitos térmicos não serão considerados.

3.4. Variáveis Internas

Para fenômenos dissipativos, o estado atual de um ponto material de um sólido depende do todo o seu histórico, que é representado pelos valores a cada instante das variáveis internas. Considera-se que a matriz óssea sofre degradação e ganho de rigidez como efeitos da remodelação, e que estes efeitos podem ter natureza mecânica ou biológica. Admite-se que o estado atual do material é definido, no caso isotérmico, pelo conhecimento do tensor de deformações e pelo conjunto de um número arbitrário N de variáveis internas escalares $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \dots \alpha_N\}$ que caracterizam a reestruturação quando um processo irreversível (remodelação) ocorre. Algumas delas, $\{\alpha_d\}_i$, serão usadas para descrever o processo de degradação da rigidez (abertura de microfissuras e perda óssea), enquanto que outras $\{\alpha_h\}_j$, serão usadas para descrever o processo de ganho de rigidez (ganho ósseo). Os índices i e j representam o número de possibilidades de variáveis internas relacionadas a forçantes ou efeitos de natureza mecânica, biológica (hormonal, genética, celular), temporal (idade de um indivíduo), etc. Neste trabalho serão considerados apenas os efeitos de natureza mecânica. Deve-se deixar claro, que as naturezas mecânicas e biológicas do remodelamento ósseo não são desacopladas e que se pode, através da resposta mecânica, estudar os mecanismos biológicos que ocorreram.

A escolha das melhores variáveis internas irá variar com o fenômeno físico em estudo, o que depende da experiência, compreensão física do fenômeno e do objetivo da aplicação.

3.5. Potencial Termodinâmico

Uma vez bem definidas as variáveis de estado, admite-se a existência de um potencial termodinâmico no qual as leis de estado possam ser deduzidas.

Utiliza-se a energia específica livre Ψ , que depende de variáveis de estado externas e internas escolhidas de modo a formular apropriadamente as equações constitutivas para a análise que envolve a mecânica, a degradação e o ganho de rigidez do processo de remodelação óssea. Desta forma obtém-se:

$$\Psi = \Psi(\varepsilon, \{\alpha_h\}_i, \{\alpha_d\}_j) \quad (3.4)$$

Considerando a utilização de duas variáveis internas, uma representando o dano e uma representando o ganho de rigidez, a energia livre de Helmholtz pode ser definida como:

$$\Psi(\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d) = \frac{1}{2} \varepsilon \cdot D(\alpha_h, \alpha_d) \cdot \varepsilon \quad (3.5)$$

sendo D o tensor constitutivo do remodelamento. Esse potencial é quadrático em ε e, portanto é convexo. O tensor D pode ser relacionado com o tensor constitutivo do material íntegro D_0 de acordo com a relação:

$$D(\alpha_h, \alpha_d) = (1 - \alpha_d)(1 + \alpha_h)D_0 \quad (3.6)$$

A partir desta definição do tensor constitutivo nota-se que o potencial é linear em relação às variáveis internas α_d e α_h . Para o caso geral da elasticidade e para um material isotrópico o tensor D_0 pode ser escrito como função do módulo de Young inicial E_0 e do coeficiente de Poisson inicial ν_0 :

$$D_0 = \begin{pmatrix} \frac{E_0(1-\nu_0)}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} & \frac{E_0\nu_0}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} & \frac{E_0\nu_0}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{E_0\nu_0}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} & \frac{E_0(1-\nu_0)}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} & \frac{E_0\nu_0}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{E_0\nu_0}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} & \frac{E_0\nu_0}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} & \frac{E_0(1-\nu_0)}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{E_0}{2(1+\nu_0)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{E_0}{2(1+\nu_0)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{E_0}{2(1+\nu_0)} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Nas análises bidimensionais foi utilizado o tensor do estado plano das deformações, pois a direção perpendicular a este plano é muito maior que as outras. O tensor D_0 fica:

$$D_0 = \frac{E_0(1-\nu_0)}{(1+\nu_0)(1-2\nu_0)} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\nu_0}{(1-\nu_0)} & 0 \\ \frac{\nu_0}{(1-\nu_0)} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-2\nu_0)}{2(1-\nu_0)} \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

No caso do estado plano de deformações a deformação na direção perpendicular ao plano analisado é igual a zero: $\varepsilon_z = 0$. Porém, a tensão na direção perpendicular ao plano estudado é diferente de zero: $\sigma_z = -\nu(\sigma_x + \sigma_y)$.

A densidade aparente ρ é afetada pelos mecanismos de perda e reparação, de forma que:

$$\rho = \rho(\alpha_d, \alpha_h) \quad (3.9)$$

Derivando a equação (3.4) em relação ao tempo, obtém-se:

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon} : \dot{\varepsilon} + \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_d} \dot{\alpha}_d + \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_h} \dot{\alpha}_h \quad (3.10)$$

Sendo $\dot{\varepsilon} = \partial \varepsilon / \partial t$, $\dot{\alpha}_d = \partial \alpha_d / \partial t$ e $\dot{\alpha}_h = \partial \alpha_h / \partial t$. Substituindo (3.10) em (3.3), encontra-se:

$$\varphi = \left(\sigma - \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon} \right) : \dot{\varepsilon} - S \dot{\theta} - \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_h} \dot{\alpha}_h - \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_d} \dot{\alpha}_d \geq 0 \quad (3.11)$$

É possível que sejam cancelados independentemente alguns termos dessa desigualdade. Se considerar, por exemplo, uma deformação elástica, fazendo constante a temperatura (isotermia – $d\theta/dt = 0$) e mantendo inalteradas as variáveis internas (sem estímulos biológicos e mecânicos em relação à perda e ganho de rigidez). Segue necessariamente, para a dissipação nula, que:

$$\sigma - \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon} = 0 \rightarrow \sigma = \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon} \quad (3.12)$$

A expressão (3.12) mostra que a tensão é uma variável que está associada à deformação total do sistema. Da mesma maneira pode-se encontrar as forças termodinâmicas em função da energia livre de Helmholtz, como mostram as leis de estado:

$$A_h = \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_h} \quad (3.13)$$

$$A_d = \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_d} \quad (3.14)$$

Pode-se entender σ, A_h, A_d como forças termodinâmicas generalizadas, no sentido de que estas atuam provocando mudanças no sistema através de fenômenos de dissipação, isto é, transformação de energia em ganho e perda óssea.

Assim como as variáveis σ, A_h, A_d são definidas a partir de parcelas do potencial termodinâmico $\Psi(\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d)$, as variáveis de estado $\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d$ podem ser definidas através do potencial termodinâmico complementar $\Psi_c(\sigma, A_h, A_d)$. Com o uso da transformada de Legendre-Fenchel pode-se transformar um potencial no seu complementar (Rockafellar, 1970). Esse potencial é definido conforme a expressão da equação (3.15). Nesta equação faz-se o uso da definição de funções convexas conjugadas.

$$\Psi_c(\sigma, A_h, A_d) = \sup_{\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d} [(\sigma, A_h, -A_d) \cdot (\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d) - \Psi(\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d)] \quad (3.15)$$

Substituindo a energia livre de Helmholtz em (3.5), na equação (3.12), chega-se a:

$$\sigma = D(\alpha_h, \alpha_d) \cdot \varepsilon \quad (3.16)$$

As forças termodinâmicas são obtidas da mesma maneira:

$$A_h = \frac{1}{2}(1 - \alpha_d)\varepsilon \cdot D \cdot \varepsilon \quad (3.17)$$

$$A_d = \frac{1}{2}(1 + \alpha_h)\varepsilon \cdot D \cdot \varepsilon \quad (3.18)$$

Pode-se definir o potencial de energia inicial Ψ_0 para o material íntegro como:

$$\Psi_0 = \frac{1}{2}\varepsilon \cdot D_0 \cdot \varepsilon \quad (3.19)$$

Substituindo (3.19) em (3.17) e (3.18) e re-arranjando, podem-se escrever as variáveis primais em função das duais:

$$(1 - \alpha_d) = \frac{2A_h}{\varepsilon \cdot D_0 \cdot \varepsilon} = \frac{A_h}{\Psi_0} \quad (3.20)$$

$$(1 + \alpha_h) = \frac{2A_d}{\varepsilon \cdot D_0 \cdot \varepsilon} = \frac{A_d}{\Psi_0} \quad (3.21)$$

$$\alpha_d = 1 - \frac{A_h}{\Psi_0} \quad (3.22)$$

$$\alpha_h = \frac{A_d}{\Psi_0} - 1 \quad (3.23)$$

Isolando as variáveis internas, colocando-as em função das variáveis duais e substituindo na equação (3.15) tem-se:

$$\Psi_C(\sigma, A_h, A_d) = \sup_{\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d} [\sigma \cdot \varepsilon + A_h \cdot \alpha_h - A_d \cdot \alpha_d - \Psi(\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d)] \quad (3.24)$$

$$\Psi_C(\sigma, A_h, A_d) = \sup_{\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d} \left[\frac{\Psi_0^2}{A_d A_h} \sigma \cdot D_0^{-1} \cdot \sigma - A_d - A_h + \frac{A_d A_h}{\Psi_0} \right] \quad (3.25)$$

A deformação pode ser escrita como:

$$\varepsilon = D_0^{-1} (1 - \alpha_d)^{-1} (1 + \alpha_h)^{-1} \cdot \sigma \quad (3.26)$$

Para escrever Ψ_0 em função das tensões termodinâmicas generalizadas substitui-se a Equação (3.26) em (3.19):

$$\Psi_0 = \frac{1}{2} [D_0^{-1} (1 - \alpha_d)^{-1} (1 + \alpha_h)^{-1} \cdot \sigma] \cdot D_0 \cdot [D_0^{-1} (1 - \alpha_d)^{-1} (1 + \alpha_h)^{-1} \cdot \sigma] \quad (3.27)$$

Agora substituindo (3.20) e (3.21) em (3.27) e agrupando os termos semelhantes obtém-se:

$$\Psi_0 = \frac{1}{2} D_0^{-1} \frac{\Psi_0^4 \sigma^2}{A_d^2 A_h^2} \quad (3.28)$$

Após alguma manipulação algébrica, isolando Ψ_0 , pode-se chegar a:

$$\Psi_0 = \sqrt[3]{2} \frac{A_d^{2/3} A_h^{2/3}}{(\sigma \cdot D_0^{-1} \cdot \sigma)^{1/3}} \quad (3.29)$$

Substituindo a Equação (3.29) na Equação (3.25) do potencial complementar pode-se chegar à Equação (3.30).

$$\Psi_C(\sigma, A_h, A_d) = 2^{1/3} (\sigma \cdot D_0^{-1} \cdot \sigma)^{1/3} A_d^{1/3} A_h^{1/3} - A_d - A_h \quad (3.30)$$

Analisando a Equação (3.5) nota-se que a função energia livre de Helmholtz, $\Psi(\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d)$, não é estritamente convexa, ela é convexa em ε e é convexa nos alfas, porém nas duas variáveis não há convexidade. O potencial $\Psi(\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d)$ é diferenciável em relação à

ε e em relação aos alfas. O potencial conjugado, $\Psi_C(\sigma, A_h, A_d)$, é diferenciável em relação às forças termodinâmicas generalizadas. Assim, as variáveis de estado $\varepsilon, \alpha_h, \alpha_d$ são definidas a partir do potencial conjugado $\Psi_C(\sigma, A_h, A_d)$, conforme apresentado nas Equações (3.31), (3.32) e (3.33), que são chamadas de Leis de Estado (Rockafellar, 1970). Nas equações seguintes a notação $\nabla_y X$ representa o gradiente de X em relação à y .

$$\varepsilon = \nabla_\sigma \Psi_C(\sigma, A_h, A_d) \quad (3.31)$$

$$\alpha_d = \nabla_{A_d} \Psi_C(\sigma, A_h, A_d) \quad (3.32)$$

$$\alpha_h = \nabla_{A_h} \Psi_C(\sigma, A_h, A_d) \quad (3.33)$$

3.6. Região Admissível

Antes de definir a região P é necessário definir o que são tensões generalizadas. As tensões generalizadas são as tensões de cauchy e as forças termodinâmicas de perda e de ganho de rigidez. A região admissível, P , é definida como o conjunto de estados de tensões generalizadas admissíveis para um dado material. Pode ser representada matematicamente através de uma função, f , denominada função de “escoamento” (na plasticidade) e neste trabalho será chamada de função de dano ou função de ganho (de rigidez) conforme apresentado na Equação (3.34). A fronteira da região admissível, P_Γ , é definida pela expressão apresentada na Equação (3.35), e o seu interior, P_Ω , é definido conforme apresentado na Equação (3.36). Superfície admissível e região elástica são os termos utilizados para denominar a fronteira e o interior da região admissível respectivamente.

$$P = \{ \sigma, A^d, A^h / f(\sigma, A^d, A^h) \leq 0 \} \quad (3.34)$$

$$P_\Gamma = \{ \sigma, A^d, A^h / f(\sigma, A^d, A^h) = 0 \} \quad (3.35)$$

$$P_\Omega = \{ \sigma, A^d, A^h / f(\sigma, A^d, A^h) < 0 \} \quad (3.36)$$

Pontos internos à região admissível representam estados de tensão a partir dos quais são iniciados processos elásticos. Tensões situadas na fronteira da região admissível são aquelas a partir das quais se iniciam processos puramente elásticos mediante descarregamento ou processos envolvendo dano ou ganho de rigidez mediante carga efetiva. Estados de tensão

generalizada exteriores a essa região são inadmissíveis. As taxas de variação das variáveis internas de perda e de ganho de rigidez para os processos descritos assumem os valores apresentados no conjunto de Equações (3.37) e (3.38).

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_d = 0 & \begin{cases} f(\sigma, A^d, A^h) < 0 \\ f(\sigma, A^d, A^h) = 0, \dot{f} < 0 \end{cases} \\ \dot{\alpha}_d \neq 0 & \begin{cases} f(\sigma, A^d, A^h) = 0, \dot{f} = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_h = 0 & \begin{cases} f(\sigma, A^d, A^h) < 0 \\ f(\sigma, A^d, A^h) = 0, \dot{f} < 0 \end{cases} \\ \dot{\alpha}_h \neq 0 & \begin{cases} f(\sigma, A^d, A^h) = 0, \dot{f} = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.38)$$

A função de dano ou de ganho de rigidez, $f(\sigma, A^d, A^h)$, delimita uma região fixa no espaço de tensões generalizadas. No entanto, para cada conjunto de valores das forças termodinâmicas é possível definir uma região diferente no espaço de tensões. Essa região, delimitada por uma função $f_{proj}(\sigma) = f(\sigma, A^d, A^h)$, corresponde à projeção da superfície de escoamento no espaço de tensões para os valores dados de A^d e A^h . As forças termodinâmicas são variáveis associadas ao encruamento do material. Dessa forma, à medida que o processo de encruamento ocorre, as forças termodinâmicas são alteradas e a região admissível no espaço de tensões se modifica.

Para completar as equações constitutivas, as leis de evolução das variáveis internas (perda e ganho de rigidez) devem ser acrescentadas às leis de estado. A teoria de processos termodinâmicos irreversíveis define uma orientação e algumas restrições para as leis de evolução de tal forma que o segundo princípio da termodinâmica seja satisfeito para qualquer evolução do material, ou seja, tal que a dissipação seja não negativa (LEMAITRE, J. & CHABOCHE, 1990).

De maneira análoga a teoria da plasticidade, dois modelos podem ser construídos. O primeiro, utilizado neste trabalho, utiliza a lei associada onde a regra da normalidade é válida. O segundo, com lei não associada, implica na construção de duplo potencial, função de duas variáveis, biconvexo e que satisfaz as desigualdades generalizadas de Fenchel, cuja proposta é encontrada nos trabalhos de BULIGA, de SAXCÉ e VALLÉE (2008), de BODOVILLÉ e de SAXCÉ (2001) entre outros.

Neste trabalho, as leis de evolução das variáveis internas serão construídas com base na análise convexa (HAN e REDDY, 1999). O teorema a seguir será utilizado para formular

as leis de evolução, que podem ser definidas de duas formas diferentes conforme apresentado por HAN e REDDY (1999). As duas formas citadas são através das variáveis primais ou através das variáveis duais.

Na aplicação do *Teorema 3* da Seção A.9 do Anexo A, assume-se que o espaço vetorial correspondente ao espaço das taxas das variáveis internas é o espaço vetorial conjugado do espaço correspondente ao espaço de tensões generalizadas.

Projetando o espaço de tensões generalizadas, P , no plano das forças termodinâmicas, denota-se esse espaço por P_A . Considera-se a região das forças termodinâmicas admissíveis P_A definida por

$$P_A = \{(A^d, A^h) / f(\sigma, A^d, A^h) \leq 0\} \quad (3.39)$$

que é considerada como um conjunto fechado, convexo e não vazio. A função $f(\sigma, A^d, A^h)$ pode ser chamada também de função de escoamento (mesmo nome usado na teoria da plasticidade). Existe uma “zona morta” onde não pode ocorrer nem degradação e nem ganho de resistência elástica e isso ocorre quando $f(\sigma, A) < 0$; enquanto que o comportamento de perda e ganho de resistência ocorre quando $f(\sigma, A) = 0$.

Seja χ a função suporte de P_A :

$$\chi(\dot{\alpha}) = \sup_{A^* \in P_A} \{A^* \cdot \dot{\alpha}\} \quad (3.40)$$

onde, no contexto da elasto-plasticidade, χ é a função dissipação e neste trabalho, é a energia dissipada ou introduzida no sistema. Essa função é conjugada a função indicatriz de P_A (Ind_{P_A}), definida por:

$$Ind_{P_A}(A) = \begin{cases} 0 & \text{se } A \in P_A \\ \infty & \text{se } A \notin P_A \end{cases} \quad (3.41)$$

e tem as seguintes propriedades: convexa, positiva homogênea, fraca semi-continua, $\chi(\dot{\alpha}) \geq 0$ e contém a origem $\chi(0) = 0$. Portanto, do teorema apresentado anteriormente:

$$\dot{\alpha} \in \partial Ind_{P_A} \leftrightarrow A \in \partial \chi(\dot{\alpha}) \quad (3.42)$$

A equação (3.42) permite estabelecer duas formas equivalentes de lei de evolução, conforme explicitado anteriormente. O Lema apresentado a seguir completa a teoria e permite escrever a lei de evolução usando um multiplicador λ .

Então, do *Lema* apresentado na Seção A.9 do Anexo A, é possível obter:

$$\dot{\alpha} \in \partial \text{Ind}_{P_A} \leftrightarrow \exists \lambda \geq 0, \text{ tal que } \dot{\alpha} \in \lambda \partial f(\sigma, A) \quad (3.43)$$

A equação (3.43) representa a generalização da lei da normalidade.

A definição de região convexa de forças termodinâmicas admissíveis deve ser feita experimentalmente, então, o contorno da região que limita os valores das forças termodinâmicas (ou a composição delas) determina uma alteração na resistência (perda, ganho ou perda e ganho simultâneos de resistência).

No trabalho em questão, a formulação em taxas proposta HECKE (1991) para o modelo elasto-plástico é adaptada para o modelo constitutivo de dano-remodelação. Introduzindo-se o potencial

$$\begin{aligned} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d, \dot{A}^h) = & \nabla_{\sigma\sigma} \psi_C(\sigma, A^d, A^h) \dot{\sigma} \cdot \dot{\sigma} + \nabla_{\sigma A^d} \psi_C(\sigma, A^d, A^h) \dot{\sigma} \cdot \dot{A}^d + \\ & + \nabla_{\sigma A^h} \psi_C(\sigma, A^d, A^h) \dot{\sigma} \cdot \dot{A}^h + \nabla_{A^d A^d} \psi_C(\sigma, A^d, A^h) \dot{A}^d \cdot \dot{A}^d + \\ & + \nabla_{A^h A^h} \psi_C(\sigma, A^d, A^h) \dot{A}^h \cdot \dot{A}^h \end{aligned} \quad (3.44)$$

e o conjugado

$$j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d, \dot{\alpha}_h) = \sup_{\dot{\sigma}, \dot{A}^d, \dot{A}^h} \left[\dot{\sigma} \cdot \dot{\varepsilon} + \dot{A}^d \cdot \dot{\alpha}_d + \dot{A}^h \cdot \dot{\alpha}_h - j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d, \dot{A}^h) \right] \quad (3.45)$$

de tal forma que

$$\dot{\varepsilon} = \nabla_{\dot{\sigma}} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d, \dot{A}^h) \quad (3.46)$$

$$\dot{\alpha}_d = \nabla_{\dot{A}^d} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d, \dot{A}^h) \quad (3.47)$$

$$\dot{\alpha}_h = \nabla_{\dot{A}^h} j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d, \dot{A}^h) \quad (3.48)$$

ou na forma equivalente

$$\dot{\sigma} = \nabla_{\dot{\varepsilon}} j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d, \dot{\alpha}_h) \quad (3.49)$$

$$\dot{A}^d = \nabla_{\dot{\alpha}_d} j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d, \dot{\alpha}_h) \quad (3.50)$$

$$\dot{A}^h = \nabla_{\dot{\alpha}_h} j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d, \dot{\alpha}_h) \quad (3.51)$$

ou ainda, na forma condensada

$$(\dot{\sigma}, \dot{A}^d, \dot{A}^h) = \nabla j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d, \dot{\alpha}_h) \Leftrightarrow (\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d, \dot{\alpha}_h) = \nabla j_C(\dot{\sigma}, \dot{A}^d, \dot{A}^h) \quad (3.52)$$

Definindo a região de taxas de forças termodinâmicas admissíveis como um cone polar de $\partial Ind_{P_A}(A)$ como mostra a Equação (3.53). A notação $[]^{-1}$ serve para indicar o cone polar de uma função. Na Seção A.8 do Anexo A podem ser encontradas mais informações sobre a definição de cone polar.

$$(\dot{A}^*) \in \dot{P}_A = [\partial Ind_{P_A}(A)]^{-1} \Leftrightarrow -\dot{\alpha} \cdot \dot{A}^* \leq 0 \quad (3.53)$$

e usando os mesmos argumentos de HECKE (1991) para o modelo elasto-plástico, pode-se obter:

$$(\dot{\alpha}) \in \partial Ind_{\dot{P}_A}(\dot{A}) \quad (3.54)$$

A equação (3.54) torna possível considerar o retorno para a “zona morta” ou o descarregamento.

Se A representa um conjunto de forças termodinâmicas em uma superfície de escoamento e \dot{A} representa a taxa no interior da região de forças admissíveis P_A , então $\partial Ind_{P_A}(\dot{A}) = 0$, o que representa que não há processo de perda ou ganho de resistência, $(-\dot{\alpha}) = (0)$.

O Quadro 1 reúne a formulação apresentada nessa seção.

Quadro 1 - Resumo das equações da elasticidade e do remodelamento.

| | |
|----------------------------------|--|
| Variáveis cinemáticas | |
| Deslocamento e Deformação | $u \quad e \quad \varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla u + (\nabla u)^T)$ |
| Variáveis Internas | |
| Alfa dano e Alfa ganho | $\alpha_d \quad e \quad \alpha_h$ |
| Variáveis termodinâmicas | |
| Tensões e Forças Termodinâmicas | σ, A_h, A_d |
| Potenciais termodinâmicos | |
| energia livre de Helmholtz | $\Psi = \Psi(\varepsilon, \{\alpha_h\}_i, \{\alpha_d\}_j)$ |
| | $\psi(\varepsilon, \alpha_d, \alpha_h) = \varepsilon \cdot D(\alpha_d, \alpha_h) \cdot \varepsilon$ |
| potencial de dissipação | $\chi(\dot{\alpha}) = \sup_{\dot{A}^* \in P_A} \{\dot{A}^* \cdot \dot{\alpha}\}$ |
| Equações constitutivas | $\sigma = \partial \Psi / \partial \varepsilon \quad A_h = \partial \Psi / \partial \alpha_h \quad A_d = \partial \Psi / \partial \alpha_d$ |
| Leis de fluxo | $(\dot{\alpha}_d, \dot{\alpha}_h) \in \partial Ind_p \Leftrightarrow (\sigma, A_d, A_h) \in \partial j(\dot{\varepsilon}, \dot{\alpha}_d, \dot{\alpha}_h)$ |

| | |
|--------------------------------------|--|
| <i>Condição de complementaridade</i> | $\lambda \geq 0, f \leq 0, \lambda f = 0$ |
| <i>Condição de consistência</i> | <i>Quando</i> $f = 0, \lambda \geq 0, \dot{f} \leq 0, \lambda \dot{f} = 0$ |

4. FORMULAÇÃO VARIACIONAL

O uso de formulações variacionais permite reunir em uma única expressão integral todos os elementos que fazem parte do problema que se está analisando, isto é, equação de equilíbrio, equação constitutiva, condições de contorno, condições iniciais, entre outros (Feijóo e Taroco, 1983). Além disso, a formulação variacional apresenta vantagens como a possibilidade de escrever as leis que governam o comportamento mecânico dos materiais de forma independente do referencial, já que a expressão integral característica da formulação variacional conduz a um escalar. E, por fim, soluções aproximadas do problema podem ser obtidas a partir de métodos numéricos de simples implementação.

Existem muitos problemas importantes na engenharia envolvendo estruturas sólidas inertes ou vivas que têm deslocamento de pontos materiais muito pequenos (matematicamente deslocamentos infinitesimais) quando submetidos a carregamentos. A seguir será derivado o tensor que caracteriza as deformações causadas por este deslocamento.

Considerando um corpo, tendo uma configuração particular B_0 no tempo de referência t_0 que muda sua configuração num tempo t . Um ponto material descreve um deslocamento u e chega a uma nova posição.

$$x = X + u(X, t) \quad (4.1)$$

Um ponto vizinho em $X + dX$ desloca-se até $x + dx$ e está relacionado a $X + dX$ pela seguinte equação:

$$x + dx = X + dX + u(X + dX, t) \quad (4.2)$$

Subtraindo (4.1) de (4.2) obtém-se:

$$dx = dX + u(X + dX, t) - u(X, t) \quad (4.3)$$

Usando a definição de gradiente de uma função vetorial a equação (4.3) pode ser escrita como:

$$dx = dX + (\nabla u) dX \quad (4.4)$$

Onde ∇u é o tensor de segunda ordem conhecido como tensor gradiente do deslocamento. O tensor de deformações ε é a parte simétrica do tensor ∇u e representa as mudanças das distâncias em um corpo contínuo admitindo-se a hipótese de deformações pequenas. Este tensor é conhecido como tensor de deformações infinitesimais. As componentes do tensor deformação infinitesimal, ε , no sistema retangular de coordenadas é:

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \right) \quad (4.5)$$

Ou matricialmente:

$$\varepsilon_{ij} = [\varepsilon] = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial X_1} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial X_2} + \frac{\partial u_2}{\partial X_1} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial X_3} + \frac{\partial u_3}{\partial X_1} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial X_2} + \frac{\partial u_2}{\partial X_1} \right) & \frac{\partial u_2}{\partial X_2} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial X_3} + \frac{\partial u_3}{\partial X_2} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial X_3} + \frac{\partial u_3}{\partial X_1} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial X_3} + \frac{\partial u_3}{\partial X_2} \right) & \frac{\partial u_3}{\partial X_3} \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

No presente trabalho, ao se assumir a ocorrência de pequenos deslocamentos, mudanças na geometria do corpo podem ser negligenciadas e a análise pode ser realizada na configuração de referência B_i .

A derivada em relação ao tempo de $u(x,t) \in U$, calculada em um instante t , é denominada velocidade. O conjunto de todos os campos de velocidades possíveis constitui o espaço vetorial V . Dada uma configuração B_t e o campo de velocidades ao qual o corpo está submetido em B_t , é possível definir o campo de taxas de deformações $\dot{\varepsilon}$. Para deslocamentos infinitesimais, este campo tensorial assume a forma apresentada na Equação (4.7).

$$\dot{\varepsilon} = \frac{1}{2} [\nabla \dot{u} + (\nabla \dot{u})^T] = (\nabla \dot{u})^S \quad (4.7)$$

Introduz-se, nesse momento, o operador linear de deformações \mathcal{D} , a partir do qual as deformações ε e as taxas de deformações $\dot{\varepsilon}$ podem ser obtidas, conforme apresentado nas Equações (4.8) a (4.10). O espaço vetorial das deformações e das taxas de deformações é representado por W .

$$\mathcal{D} = (\nabla)^S \quad (4.8)$$

$$\varepsilon = \mathcal{D} u \quad (4.9)$$

$$\dot{\varepsilon} = \mathcal{D} v \quad (4.10)$$

Os elementos u , para os quais $\mathcal{D}u = 0$, constituem o subespaço de U chamado núcleo do operador \mathcal{D} . Esse subespaço, aqui representado por $N(\mathcal{D})$, contém os campos u que produzem movimentos de corpo rígido.

$$N(\mathcal{D}) = \{u(x,t) \in U / \mathcal{D}u = 0\} \quad (4.11)$$

Até esse momento, considerou-se que o corpo pode se movimentar livremente. No entanto, na maioria dos casos, os corpos estão sujeitos a restrições cinemáticas. No presente trabalho, considerou-se que o corpo está sujeito a restrições homogêneas do tipo bilateral na parte Γ_u do contorno Γ de B . Restrições bilaterais são aquelas em que, se o movimento está impedido em um sentido, também está impedido no sentido oposto. Dessa forma, o conjunto dos campos de deslocamento cinematicamente admissíveis foi definido como:

$$U = \{u(x)/u|_{\Gamma_u} = 0\} \quad (4.12)$$

Outro conceito importante da Mecânica do Contínuo é o das forças ou do sistema de forças que atua sobre um corpo. Feijó e Taraco (1983) afirmam que, no cotidiano, para avaliar as forças aplicadas em um corpo, costuma-se provocar um movimento virtual no corpo em contraposição ao seu movimento natural. Por exemplo, a fim de estimar o peso de um objeto, basta levantá-lo levemente, criando um movimento virtual que permite estimar seu peso a partir do trabalho realizado para erguê-lo. Assim, as forças que atuam em um corpo podem ser definidas a partir da potência virtual que executam quando na presença de um campo de velocidades. Dessa forma, as forças L_t que podem atuar sobre um corpo em um instante t são representadas por funcionais lineares e contínuos que mapeiam elementos do espaço V no conjunto real, conforme apresentado na Equação (4.13). O número real, P_e , associado ao sistema de forças que opera sobre o campo de velocidades, v , é denominado potência virtual externa. Verifica-se que as forças L_t pertencem ao espaço dual topológico de V que se representa por V^* .

$$P_e = L_t(v) \quad (4.13)$$

O sistema de forças L_t está associado a dois tipos de cargas: as forças de corpo, b_t , e as forças de superfície, τ_t , atuantes em $\Gamma_\tau = \Gamma - \Gamma_u$. Assim, a potência virtual externa pode ser representada por:

$$P_e = L_t(v) = \int_B b_t \cdot v dB + \int_{\Gamma_\tau} \tau_t \cdot v d\Gamma \quad (4.14)$$

Finalmente, quando um corpo é submetido à ação de forças externas ocorrem deformações em sua estrutura. Como as partículas permanecem unidas, tem de existir uma distribuição de esforços internos capaz de mantê-las dessa forma. Para estimar a distribuição de esforços internos existentes em um corpo é preciso submetê-lo a um movimento virtual que gere uma deformação. Por exemplo, para estimar a tensão que atua em uma correia é

preciso deformá-la. Movimentos de corpo rígido não fornecem qualquer informação sobre as tensões a que essa está submetida.

Definem-se os esforços internos como funcionais lineares e contínuos que mapeiam os elementos do espaço vetorial W no conjunto real, conforme apresentado na Equação (4.15). O número real associado aos esforços internos correspondentes a um campo de taxas de deformações é denominado potência virtual interna e representado por P_i . Verificase que os esforços internos pertencem ao espaço dual topológico de W que se representa por W^* .

$$P_i = -\langle \sigma, \dot{\epsilon} \rangle = -\int_{B_t} \sigma \cdot \dot{\epsilon} dB_t \quad (4.15)$$

Uma distribuição de tensões σ está em equilíbrio com as cargas aplicadas ao corpo se o Princípio das Potências Virtuais é verificado, isto é:

$$P_e + P_i = 0 \quad \forall v \in V \quad (4.16)$$

ou ainda:

$$\langle \sigma, \mathcal{D}v \rangle = L_t(v) \quad \forall v \in V \quad (4.17)$$

A partir do Princípio das Potências Virtuais é possível obter a equação local de equilíbrio da Mecânica do Contínuo. Isto é, à forma variacional do problema de valor de contorno corresponde uma forma local do problema. A potência virtual interna, P_i , pode ser definida conforme apresentado na Equação (4.18), devido à simetria do tensor de tensões. Aplicando a propriedade apresentada na Equação (4.19) à Equação (4.18), obtém-se o resultado apresentado na Equação (4.20).

$$P_i = -\int_{B_t} \sigma \cdot \dot{\epsilon} dB_t = \int_{B_t} \sigma \cdot (\nabla v)^S dB_t = \int_{B_t} \sigma \cdot \nabla v dB_t \quad (4.18)$$

$$\text{div}(\sigma v) = \sigma \cdot \nabla v + \text{div} \sigma v \quad (4.19)$$

$$P_i = -\int_{B_t} \text{div}(\sigma v) dB_t = \int_{B_t} \text{div} \sigma \cdot v dB_t \quad (4.20)$$

Aplicando o Teorema da Divergência, obtém-se:

$$P_i = -\int_{\Gamma_\tau} \sigma n \cdot v d\Gamma_\tau = \int_{B_t} \text{div} \sigma \cdot v dB_t \quad (4.21)$$

Substituindo as Equações (4.21) e (4.14) no Princípio das Potências Virtuais, obtém-se o resultado apresentado na Equação (4.22). A partir desse, as equações de equilíbrio locais da Mecânica do Contínuo são obtidas, conforme apresentado em (4.23) e (4.24).

$$\int_{B_t} (\text{div } \sigma + b_t) \cdot v dB_t + \int_{\Gamma_t} (\tau_t - \sigma n) \cdot v d\Gamma_t = 0 \quad (4.22)$$

$$\text{div } \sigma + b_t = 0 \quad \text{em } B_t \quad (4.23)$$

$$\tau_t = \sigma n \quad \text{em } \Gamma_t \quad (4.24)$$

Finalmente, passa-se ao problema dual do problema de equilíbrio conhecido como problema de compatibilidade. Dado um campo de deformações $\varepsilon \in W$, diz-se que ε é compatível se existe $v \in V$, tal que $\dot{\varepsilon} = \mathcal{D} v$. A condição necessária e suficiente para que o campo de deformações seja compatível é equivalente ao seguinte enunciado variacional:

$$\langle \sigma^*, \dot{\varepsilon} \rangle = 0 \quad \forall \sigma^* \in S^0 \quad (4.25)$$

Na Equação (4.32), S^0 é o subespaço das tensões auto-equilibradas.

4.1. Formulação Variacional em Taxas

A seguir são apresentadas as formulações variacionais em taxas para o problema de equilíbrio e para o problema de compatibilidade. Os princípios de mínimo associados aos dois problemas em taxas são apresentados. O desenvolvimento matemático desta seção baseia-se no trabalho de Hecke (1991).

Na formulação variacional em taxas do problema de equilíbrio, também denominada de formulação cinemática ou primal, pretende-se encontrar velocidades cinematicamente admissíveis $\dot{u} \in V$ que satisfaçam a igualdade apresentada na equação (4.26).

$$\langle \dot{\sigma}, \mathcal{D}(v) \rangle = \dot{L}_t(v) \quad \forall v \in V \quad (4.26)$$

As taxas de tensões, $\dot{\sigma}$, presentes na Equação (4.26), estão relacionadas às velocidades cinematicamente admissíveis, \dot{u} , por meio da relação constitutiva:

$$\dot{\sigma} = \nabla j(\mathcal{D}\dot{u}) \quad (4.27)$$

Como o funcional j é convexo, é possível reescrever a relação constitutiva a partir da definição de subdiferencial. Assim, a Equação (4.27) assume a forma:

$$j(\dot{\varepsilon}^*) - j(\dot{\varepsilon}) \geq \dot{\sigma}(\dot{\varepsilon}^* - \dot{\varepsilon}) \quad \forall \dot{\varepsilon}^* \quad (4.28)$$

Definindo o $J(\dot{\varepsilon})$ como:

$$J(\dot{\varepsilon}) = \int_B j(\dot{\varepsilon}) dB \quad (4.29)$$

Pode-se reescrever a Equação (4.28) da seguinte maneira:

$$J(\dot{\varepsilon}^*) - J(\dot{\varepsilon}) \geq \langle \dot{\sigma}, \dot{\varepsilon}^* - \dot{\varepsilon} \rangle \quad (4.30)$$

Restringindo a Equação (4.30) para taxas de deformações compatíveis $\dot{\varepsilon}$ e utilizando a Equação (4.33), obtém-se:

$$J(\mathcal{D}v) - J(\mathcal{D}\dot{u}) \geq \dot{L}_t(v - \dot{u}) \quad \forall v \in V \quad (4.31)$$

O resultado apresentado na Equação (4.31) pode ser reescrito como:

$$J(\mathcal{D}v) - \dot{L}_t(v) \geq J(\mathcal{D}\dot{u}) + \dot{L}_t(\dot{u}) \quad \forall v \in V \quad (4.32)$$

A partir da Equação (4.32), é possível identificar o seguinte princípio de mínimo:

$$\Pi(\dot{u}) = \inf_{v \in V} \Pi(v) \quad (4.33)$$

$$\Pi(v) = J(\mathcal{D}v) - \dot{L}_t(v) \quad (4.34)$$

As condições de existência e unicidade da solução do problema formulado por meio da Equação (4.33) dependem das propriedades do funcional $\Pi(\dot{u})$ (ou ainda de j , pois \dot{L}_t é linear) e do domínio V . O funcional j é convexo e diferenciável, sendo estritamente convexo nos casos em que ocorre encruamento. No caso em que há encruamento efetivo, a existência da solução do princípio de mínimo é garantida para qualquer taxa de carga, sendo que a solução não será única se movimentos de corpo rígido forem incluídos no conjunto de velocidades admissíveis.

Já a formulação variacional em taxas do problema de compatibilidade, também denominada formulação estática ou dual, consiste em determinar o campo de taxas de tensões, $\dot{\sigma}$, equilibradas com as taxas de forças externas $\dot{L}_t(v)$, tal que a Equação (4.35) seja satisfeita.

$$\langle \dot{\sigma}^* - \dot{\sigma}, \dot{\varepsilon} \rangle = 0 \quad \forall \dot{\sigma}^* \in \dot{S}_t \quad (4.35)$$

$$\dot{S}_t = \{ \dot{\sigma} \in W^* / \langle \dot{\sigma}, \mathcal{D}(v) \rangle = \dot{L}_t(v), \forall v \in V \} \quad (4.36)$$

As taxas de deformação, $\dot{\varepsilon}$, estão relacionadas às taxas de tensões, $\dot{\sigma}$, por meio da relação constitutiva apresentada na Equação (4.37).

$$\dot{\varepsilon} \in \partial j_C(\dot{\sigma}) \quad (4.37)$$

Aplicando a definição de subdiferencial, é possível reescrever a Equação (4.37) como:

$$j_C(\dot{\sigma}^*) - j_C(\dot{\sigma}) \geq (\dot{\sigma}^* - \dot{\sigma}) \cdot \dot{\varepsilon} \quad \forall \dot{\sigma}^* \in W^* \quad (4.38)$$

Definindo o $J_C(\dot{\varepsilon})$ como:

$$J_C(\dot{\sigma}) = \int_B j_C(\dot{\sigma}) dB \quad (4.39)$$

É possível reescrever a Equação (4.38) da seguinte forma:

$$J_C(\dot{\sigma}^*) - J_C(\dot{\sigma}) \geq \langle \dot{\sigma}^* - \dot{\sigma}, \dot{\varepsilon} \rangle \quad \forall \dot{\sigma}^* \in W^* \quad (4.40)$$

Segundo a Equação (4.35), se $\dot{\sigma} \in \dot{S}_t$, o segundo membro da Equação (4.40) é nulo.

Assim, essa equação pode ser reescrita como:

$$J_C(\dot{\sigma}^*) - J_C(\dot{\sigma}) \geq 0 \quad \forall \dot{\sigma}^* \in \dot{S}_t \quad (4.41)$$

$$J_C(\dot{\sigma}^*) \geq J_C(\dot{\sigma}) \quad \forall \dot{\sigma}^* \in \dot{S}_t \quad (4.42)$$

A partir da desigualdade apresentada em (4.42), reconhece-se o problema de mínimo:

$$J_C(\dot{\sigma}) = \inf_{\dot{\sigma}^* \in \dot{S}_t} J_C(\dot{\sigma}^*) \quad (4.43)$$

As condições de existência e unicidade do problema formulado na equação (4.43) dependem das características do funcional $j_C(\dot{\sigma})$ e das características do subconjunto de W dado por $\dot{S}_t \cap \text{dom } J_C$. O funcional $j_C(\dot{\sigma})$ é próprio, estritamente convexo e coercivo. Por ser um funcional próprio, existe um conjunto não vazio de taxas de tensões para os quais $j_C(\dot{\sigma})$ toma um valor finito e, por consequência, isto vale para $J_C(\dot{\sigma})$. Este conjunto de tensões admissíveis será denotado por $\text{dom } J_C(\dot{\sigma})$. O conjunto $\dot{S}_t \cap \text{dom } J_C$ corresponde às taxas de tensões admissíveis que satisfazem o princípio das Potências Virtuais. No caso em que esse conjunto é vazio, o funcional $J_C(\dot{\sigma})$ é identicamente infinito e, portanto, não há solução finita para o problema de minimização. No caso em que $\dot{S}_t \cap \text{dom } J_C$ é um conjunto não-vazio de W^* , é possível aplicar o *teorema 5* da seção A11 do anexo A.

Como o funcional $j_C(\dot{\sigma})$ é próprio, convexo, *l.s.c.* e coercivo, o problema de minimização formulado na Equação (4.43) possui solução. Além disso, o funcional $j_C(\dot{\sigma})$ é estritamente convexo, de forma que a solução do problema de minimização formulado na Equação (4.43) é única.

4.2. Formulação em Incrementos Finitos

Processos evolutivos podem ser aproximados através da descrição do comportamento do material em certos instantes obtidos em intervalos de tempo selecionados. O problema de evolução consiste em avaliar as variáveis no fim do intervalo de tempo a partir de seus valores no início do intervalo e dos valores dos incrementos sofridos pelas variáveis ao longo do intervalo (Freitas, 2008 apud Hjiiaj, Fortin e de Saxcé, 2003). Dessa forma, a o estado do corpo no instante $t + \Delta t$ é obtido a partir do estado do corpo em um instante t . A seguir é apresentada esta aproximação para algumas variáveis.

$$u_{t+\Delta t} = u_t + \Delta u \quad (4.44)$$

$$\varepsilon_{t+\Delta t} = \varepsilon_t + \Delta \varepsilon \quad (4.45)$$

$$\sigma_{t+\Delta t} = \sigma_t + \Delta \sigma \quad (4.46)$$

$$A_{t+\Delta t}^d = A_t^d + \Delta A^d \quad (4.47)$$

$$A_{t+\Delta t}^h = A_t^h + \Delta A^h \quad (4.48)$$

$$\alpha_{t+\Delta t}^d = \alpha_t^d + \Delta \alpha^d \quad (4.49)$$

$$\alpha_{t+\Delta t}^h = \alpha_t^h + \Delta \alpha^h \quad (4.50)$$

A formulação cinemática para a análise de danificação e recuperação de rigidez consiste em encontrar incrementos de deslocamento cinematicamente admissíveis, $\Delta u \in U$, que satisfaçam:

$$\langle \sigma + \Delta \sigma, \mathcal{D}v \rangle = L_{t+\Delta t}(v), \quad \forall v \in V \quad (4.51)$$

Na Equação (4.51), $\Delta \sigma$ está relacionado com Δu através da relação constitutiva:

$$\Delta \sigma = \nabla \bar{j}(\Delta \varepsilon) \quad (4.52)$$

A Equação (4.52) é equivalente a:

$$\bar{j}(\Delta \varepsilon^*) - \bar{j}(\Delta \varepsilon) \geq \Delta \sigma \cdot (\Delta \varepsilon^* - \Delta \varepsilon) \quad \forall \Delta \varepsilon^* \quad (4.53)$$

Define-se $\bar{J}(\Delta \varepsilon)$ da mesma forma que se definiu $J(\dot{\varepsilon})$, isto é:

$$\bar{J}(\Delta \varepsilon) = \int_B \bar{j}(\Delta \varepsilon) dB \quad (4.54)$$

Assim, a desigualdade apresentada em (4.53) pode ser reescrita como:

$$\bar{J}(\Delta \varepsilon^*) - \bar{J}(\Delta \varepsilon) \geq \langle \Delta \sigma, \Delta \varepsilon^* - \Delta \varepsilon \rangle \quad \forall \Delta \varepsilon^* \in W \quad (4.55)$$

Restringindo a igualdade apresentada em (4.55) para $\Delta \varepsilon^*$ compatíveis e utilizando a equação de equilíbrio apresentada em (4.51), a desigualdade (4.55) assume a forma apresentada em (4.58).

$$\bar{J}(\mathcal{D}\Delta u^*) - \bar{J}(\mathcal{D}\Delta u) \geq L_{t+\Delta t}(\Delta u^* - \Delta u) - L_t(\Delta u^* - \Delta u) \quad (4.56)$$

$$\bar{J}(\mathcal{D}\Delta u^*) - \bar{J}(\mathcal{D}\Delta u) \geq L_{t+\Delta t}(\Delta u^* - \Delta u) - \langle \sigma, \mathcal{D}(\Delta u^* - \Delta u) \rangle \quad (4.57)$$

$$\bar{J}(\mathcal{D}\Delta u^*) - L_{t+\Delta t}(\Delta u^*) + \langle \sigma, \mathcal{D}(\Delta u^*) \rangle \geq \bar{J}(\mathcal{D}\Delta u) - L_{t+\Delta t}(\Delta u) + \langle \sigma, \mathcal{D}(\Delta u) \rangle \quad (4.58)$$

A desigualdade apresentada corresponde ao seguinte princípio de mínimo:

$$\bar{\Pi}(\Delta u) = \inf_{\Delta u^* \in U} \bar{\Pi}(\Delta u^*) \quad (4.59)$$

onde:

$$\bar{\Pi}(\Delta u) = \bar{J}(\mathcal{D}v) - L_{t+\Delta t}(\Delta u) + \langle \sigma, \mathcal{D}(\Delta u) \rangle \quad (4.60)$$

A formulação estática para a análise de danificação e recuperação de rigidez incrementais consiste em encontrar incrementos de tensões de forma que as tensões finais sejam equilibradas, isto é, $\sigma + \Delta \sigma \in S_{t+\Delta t}$ e de forma que a Equação (4.61) seja satisfeita.

$$\langle \sigma^* - (\sigma + \Delta \sigma), \Delta \varepsilon \rangle = 0, \quad \forall \sigma^* \in S_{t+\Delta t} \quad (4.61)$$

Na equação (4.61), $\Delta \sigma$ está relacionado com $\Delta \varepsilon$ pela relação constitutiva apresentada na Equação (4.62).

$$\Delta \varepsilon \in \partial \bar{j}_c(\Delta \sigma) \quad (4.62)$$

Aplicando a definição de subgradiente, pode-se reescrever a Equação (4.62) da seguinte forma:

$$\bar{j}_C(\Delta\sigma^*) - \bar{j}_C(\Delta\sigma) \geq (\Delta\sigma^* - \Delta\sigma) \cdot \Delta\varepsilon \quad \forall \Delta\sigma^* \quad (4.63)$$

Definindo-se $\bar{J}_C(\Delta\sigma)$ como:

$$\bar{J}_C(\Delta\sigma) = \int_B \bar{j}_C(\Delta\sigma) dB \quad (4.64)$$

Pode-se reescrever a desigualdade apresentada em (4.63) como:

$$\bar{J}_C(\Delta\sigma^*) - \bar{J}_C(\Delta\sigma) \geq 0 \quad (4.65)$$

A desigualdade apresentada em (4.65) corresponde ao seguinte princípio de mínimo:

$$\bar{J}_C(\Delta\sigma) = \inf_{\Delta\sigma^*} \bar{J}_C(\Delta\sigma^*) \quad (4.66)$$

5. ALGORITMOS PARA SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE DANO E GANHO DE RIGIDEZ

Neste capítulo, são apresentados os métodos numéricos e os algoritmos utilizados para resolver o problema de otimização relacionado à teoria termodinâmica de dano e ganho de rigidez descrita anteriormente. O procedimento de solução combina um método Quase-Newton para a resolução do equilíbrio global e um algoritmo de programação matemática (complementaridade não-linear, Newton-Raphson, etc, conforme o material) para a resolução da equação constitutiva com dano e ganho. A discretização espacial é obtida aplicando o Método dos Elementos Finitos e a discretização temporal foi introduzida independentemente da espacial.

5.1. Método dos Elementos Finitos

A solução de um problema de dano e ganho de um corpo poroso considerado contínuo é uma função que descreve os deslocamentos dos pontos do domínio, no caso, um domínio plano. Essa função pertence a um espaço de dimensão infinita, podendo ser obtida a partir da combinação linear das infinitas funções que formam a base do espaço vetorial do qual faz parte. O Método de Galerkin propõe construir uma solução aproximada para o problema, tomando um número finito de funções que formam a base do espaço ao qual pertence a solução exata. Assim, a solução aproximada é formada a partir da combinação linear de um número finito de termos. Como se pode perceber, o Método de Galerkin torna-se uma ferramenta útil a partir do momento em que se dispõe de uma técnica sistemática para a construção das funções que formam a base do espaço vetorial, denominadas funções base (Oden, 1981). O Método dos Elementos Finitos é uma técnica que permite determinar as funções que formam a base do espaço vetorial aproximado. Segundo esse método, as funções base são construídas a partir de funções definidas em cada um dos elementos (subdomínios) no qual o domínio foi dividido. As funções definidas em cada elemento são denominadas funções de forma. A Figura 18 ilustra a maneira como as funções base são formadas a partir das funções de forma para um problema plano. É possível definir um elemento máster com um sistema de coordenadas local com base no qual as funções de forma são definidas. Todos os cálculos do método são, então, efetuados sobre esse elemento máster que se relaciona com os elementos da malha a partir de uma transformação (mudança de coordenadas). As

contribuições de cada elemento da malha são, então, somadas a fim de se obter a solução aproximada do problema.

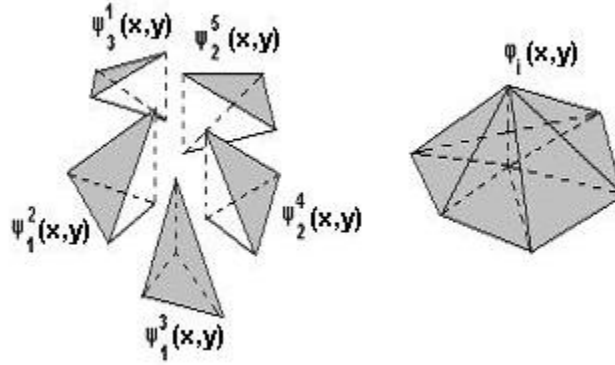


Figura 18 - Função base (φ_i) formada a partir das funções de forma (Freitas, 2008).

O problema de dano e ganho de rigidez plano pode ser definido para o domínio Ω pela Equação (5.1).

$$\int_{\Omega} (B^i)^T (\sigma^i + \Delta \sigma^i) d\Omega = \int_{\Omega} (N^i)^T (b + \Delta b) d\Omega + \int_{\Gamma} (N^i)^T (\tau + \Delta \tau) d\Gamma \quad (5.1)$$

Na Equação (5.1), $\Delta \sigma^i$ está relacionado com $\Delta \hat{U}^i$ pela relação constitutiva:

$$\Delta \sigma^i = \nabla \bar{j}(\mathcal{D}(\Delta \hat{U}^i)) \quad (5.2)$$

O vetor local de incrementos de deslocamento é formado a partir da combinação linear das funções de forma do elemento i , conforme descrito pelas Equações de (5.3) a (5.6). Nessas equações, ψ^i representa as funções de forma, N^i representa a matriz contendo as funções de forma, $\Delta \hat{U}^i$ representa o vetor contendo as componentes x e y dos deslocamentos nodais e n representa o número de nós do elemento i .

$$\Delta U^i(x, y) = [N^i(x, y)]^T \Delta \hat{U}^i(x, y) \quad (5.3)$$

$$(\Delta \hat{U}^i)^T = [U_{x1}^i \quad U_{y1}^i \quad U_{x2}^i \quad U_{y2}^i \quad \dots \quad U_{xn}^i \quad U_{yn}^i] \quad (5.4)$$

$$[N^i]^T = \begin{bmatrix} \psi_1^i & 0 & \psi_2^i & 0 & \dots & \psi_n^i & 0 \\ 0 & \psi_1^i & 0 & \psi_2^i & \dots & 0 & \psi_n^i \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

$$\Delta U^i(x, y) = \begin{bmatrix} U_{x1}^i \psi_1^i + U_{x2}^i \psi_2^i + \dots + U_{xn}^i \psi_n^i \\ U_{y1}^i \psi_1^i + U_{y2}^i \psi_2^i + \dots + U_{yn}^i \psi_n^i \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

A matriz B_i para campos aproximados de deformação é dada por:

$$L\Delta U^i = L[N^i]^T \Delta \hat{U}^i = B^i \Delta \hat{U}^i \quad (5.7)$$

Onde:

$$L = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

Finalmente, a equação de equilíbrio global, fornecida pelo diferencial de $\Phi(\Delta U)$, é dada pela Equação (5.9):

$$\Phi(\Delta U) = (F_{\text{int}} + \Delta F_{\text{int}}) - (F_{\text{ext}} + \Delta F_{\text{ext}}) \quad (5.9)$$

onde os termos F_{int} , ΔF_{int} , F_{ext} e ΔF_{ext} são obtidos a partir da soma das contribuições de todos os elementos:

$$F_{\text{Ext}}^i = \int_{\Omega_e} (N^i)^T b d\Omega + \int_{\Gamma^e} (N^i)^T t d\Gamma \quad (5.10)$$

$$\Delta F_{\text{Ext}}^i = \int_{\Omega_e} (N^i)^T \Delta b d\Omega + \int_{\Gamma^e} (N^i)^T \Delta t d\Gamma \quad (5.11)$$

$$F_{\text{Int}}^i = \int_{\Omega_e} (B^i)^T \sigma^i d\Omega \quad (5.12)$$

$$\Delta F_{\text{Int}}^i = \int_{\Omega_e} (B^i)^T \Delta \sigma^i d\Omega \quad (5.13)$$

5.2. Algoritmos para a resolução do problema de equilíbrio

Esta seção descreve os procedimentos adotados para a solução do problema de equilíbrio. A forma variacional cinemática do problema de equilíbrio consiste em encontrar incrementos de deslocamentos cinematicamente admissíveis, $\Delta u \in U$, tais que a Equação (5.14) seja satisfeita.

$$\langle \sigma + \Delta \sigma, \mathcal{D}(\Delta u^*) \rangle = L_{t+\Delta t}(\Delta u^*) \quad (5.14)$$

Na Equação (5.14), $\Delta \sigma$ está relacionado com Δu pela equação constitutiva:

$$\Delta \sigma = \nabla \bar{j}(\mathcal{D}(\Delta u)) \quad (5.15)$$

Com o uso da propriedade de convexidade de $\bar{J}(\Delta\epsilon)$, chegou-se ao seguinte princípio de mínimo equivalente à forma variacional apresentada:

$$\inf_{\Delta u^* \in U} \bar{J}(\mathcal{D}(\Delta u)) - L_{t+\Delta t}(\Delta u) + \langle \sigma, \mathcal{D}(\Delta u) \rangle \quad (5.16)$$

Reconhece-se no princípio de mínimo apresentado um problema de otimização. Nesse tipo de problema, pretende-se minimizar uma função objetivo $f(x)$, onde $x \in R_n$. Os algoritmos de otimização que permitem resolver o problema descrito geram, a partir de um ponto inicial x_0 , uma seqüência de iterações $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ que termina quando não se pode fazer mais progresso ou quando se obtém um ponto suficientemente próximo da solução (Nocedal e Wright, 1999). Para gerar o próximo ponto da seqüência de iterações a partir de um ponto x_k , os algoritmos utilizam informações a respeito da função f em x_k e, possivelmente, informações das iterações anteriores x_0, x_1, \dots, x_{k-1} . Essas informações são utilizadas para encontrar um ponto x_{k+1} , no qual o valor da função f seja menor do que o valor de f em x_k . Alguns métodos escolhem uma direção p_k e procuram ao longo dessa direção um novo ponto x_{k+1} , no qual o valor de f seja menor do que o valor de f em x_k . A iteração é dada por:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \quad (5.17)$$

O sucesso do método depende de escolhas eficientes da direção p_k e do tamanho do passo α_k .

A maioria dos métodos requer que p_k seja uma direção descendente, já que essa propriedade garante que o valor da função f diminua ao longo dessa direção. Assim, a direção p_k costuma ter a forma apresentada na Equação (5.18).

$$p_k = -B_k^{-1} \nabla f_k \quad (5.18)$$

Na Equação (5.18), B_k é uma matriz simétrica não-singular. No Método de Newton, B_k é o Hessiano $\nabla^2 f(x_k)$. Nos métodos de Quase-Newton, B_k é uma aproximação do Hessiano atualizada a cada iteração.

Fazendo $B_k^{-1} = H_k$, obtém-se:

$$p_k = -H_k \nabla f_k \quad (5.19)$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k H_k \nabla f_k \quad (5.20)$$

Para o problema de equilíbrio em análise, a função objetivo f é dada por:

$$\bar{\Pi}(\Delta u) = \bar{J}(\mathcal{D}(\Delta u)) - L_{t+\Delta t}(\Delta u) + \langle \sigma, \mathcal{D}(\Delta u) \rangle \quad (5.21)$$

No presente trabalho, a função objetivo será minimizada utilizando o Método de Quase-Newton. A aplicação desse método exige que se determine ∇f_k . Por definição, um funcional $f:U \rightarrow R$ é dito diferenciável em $u \in U$, se existe um operador Df definido por:

$$Df(u)(v) = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{[f(u + \theta v) - f(u)]}{\theta} \quad (5.22)$$

A anulação do diferencial do funcional a ser minimizado fornece a equação de equilíbrio:

$$\langle \Delta \sigma, \mathcal{D}(\Delta v) \rangle + \langle \sigma, \mathcal{D}(\Delta v) \rangle - L_{t+\Delta t}(\Delta v) = 0 \quad (5.23)$$

$$\bar{\Pi}(\Delta u) = \langle \sigma_{t+\Delta t}, \mathcal{D}(\Delta v) \rangle - L_{t+\Delta t}(\Delta v) = 0 \quad (5.24)$$

$$\langle \sigma_{t+\Delta t}, \mathcal{D}(\Delta v) \rangle = L_{t+\Delta t}(\Delta v) \quad (5.25)$$

A função Φ , dada pela diferença entre as forças internas e as forças externas na forma discreta, é denominada resíduo e corresponde ao diferencial do funcional que se pretende minimizar. Assim, para o problema em análise a Equação (5.20) assume a forma discreta:

$$\Delta U_{k+1} = \Delta U_k - \alpha_k H_k \Phi(\Delta U_k) \quad (5.26)$$

Nesse trabalho, a atualização de H_k foi realizada a partir do método BFGS. A teoria envolvida na derivação do método pode ser encontrada em Nocedal e Wright (1999). A fórmula de atualização de H_k proposta pelo método é apresentada na Equação (5.27).

$$U_{k+1} = U_k + \frac{s_k \otimes s_k}{s_k \cdot y_k} - \frac{(H_k \cdot y_k) \otimes (H_k \cdot y_k)}{y_k \cdot H_k \cdot y_k} + (y_k \cdot H_k \cdot y_k) \varpi \otimes \varpi \quad (5.27)$$

onde:

$$y_k = \Phi(\Delta U_{k+1}) - \Phi(\Delta U_k) \quad (5.28)$$

$$s_k = \Delta U_{k+1} - \Delta U_k \quad (5.29)$$

$$\varpi = \frac{s_k}{s_k \cdot y_k} - \frac{H_k \cdot y_k}{y_k \cdot H_k \cdot y_k} \quad (5.30)$$

A adoção de uma aproximação da matriz inversa do Hessiano possui uma vantagem, além do fato de não ser necessário determinar as derivadas segundas da função objetivo. Sabe-se que o Hessiano deve ser uma matriz positivo-definida. Em geral, longe do mínimo, não há garantia de que o Hessiano seja positivo definido, de forma que incrementos de deslocamento na direção calculada pelo Método de Newton utilizando o Hessiano podem levar a pontos onde o valor da função está aumentando (Press et al, 1992). A estratégia do Método de Quase-Newton consiste em adotar uma matriz simétrica, positivo-definida como aproximação inicial do Hessiano e construir as demais aproximações H_k de forma que a matriz

H_k permaneça simétrica e positivo-definida. Longe do mínimo, esse procedimento assegura que os incrementos de deslocamento ocorram ao longo da direção de decréscimo da função objetivo. Próximo ao mínimo, a fórmula de atualização de H_k aproxima-se do Hessiano, obtendo-se a convergência quadrática do Método de Newton.

Quando não se está suficientemente próximo do mínimo, acrescentar ao deslocamento inicial todo o incremento calculado, $-H_k \nabla f_k$, pode não levar a um decréscimo da função objetivo, mesmo que a aproximação do Hessiano seja uma matriz positivo-definida (Press et al, 1992). O único aspecto que se pode garantir é que inicialmente a função objetivo decresce na direção do incremento calculado, no entanto, após um decréscimo inicial, a função pode passar a crescer. Por essa razão, adotam-se métodos de cálculo de passo. Dentre eles pode-se citar o método secante, que serve para determinar o tamanho do passo a ser dado na direção determinada. Descrições do Método Secante podem ser encontradas em Press et al (1992) e Akay (1994).

Nos Quadros 2 e 3 são apresentados os algoritmos utilizados para resolver o problema de equilíbrio. Os algoritmos apresentados podem ser encontrados em (Press et al, 1992).

Quadro 2 - ALGORITMO DO MÉTODO DE QUASE-NEWTON COM EQUAÇÃO DE ATUALIZAÇÃO BFGS.

| |
|---|
| Determinar U_1 |
| Determinar H_1 (em geral, $H_1 = I$) |
| Determinar $\nabla f_1 = \Phi(\Delta U_1)$ |
| Determinar $p_1 = -\Phi(\Delta U_1)$ |
| Fazer para $k=1$, ITMAX (onde ITMAX é o número máximo de iterações admitido) |
| Determinar α_k , tal que $p_k [\Phi(\nabla U_k + \alpha_k p_k)] \leq TOL \{p_k [\Phi(\Delta U_k)]\}$, onde: |
| TOL é um valor de tolerância. |
| Fazer $\Delta U_{k+1} = \Delta U_k + \alpha_k p_k$ |
| Fazer $s_k = \Delta U_{k+1} - \Delta U_k$ |
| Calcular $\Phi(\Delta U_{k+1})$ |
| TEST = 0.0 |
| TEMP = 0.0 |
| Fazer TEST = $(\Delta U_k) \cdot \Phi(\Delta U_k)$ |
| Fazer TEMP = $(\Delta U_{k+1}) \cdot \Phi(\Delta U_{k+1})$ |
| Se $ TEMP \leq GTOL TEST $, finalizar a rotina (critério de convergência satisfeito) |

Fazer $y_k = \Phi(\Delta U_{k+1}) - \Phi(\Delta U_k)$

Fazer $hy_k = H_k \cdot y_k$

Fazer $fac = y_k \cdot s_k$

Fazer $fae = y_k \cdot hy_k$

Fazer $sumy = y_k \cdot y_k$

Fazer $sums = s_k \cdot s_k$

Se fac menor que $\sqrt{EPS \cdot sumy \cdot sums}$, fazer

$$fac = \frac{1.0}{fac}$$

$$fad = \frac{1.0}{fae}$$

$$y_k = fac \cdot s_k - fad \cdot hy_k$$

$$H_{k+1} = fac \cdot s_k \cdot s_k - fad \cdot hy_k \cdot hy_k + fae \cdot y_k \cdot y_k$$

Fim

Fazer $p_{k+1} = -H_{k+1} \cdot \Phi(\Delta U_{k+1})$

Fim

Quadro 3 - QUADRO DO MÉTODO SECANTE UTILIZADO PARA DETERMINAR O TAMANHO DO PASSO α_k

Fazer $\alpha_1 = 0$

Fazer $\alpha_2 = 1$

Fazer $\alpha_k = 1$

Fazer MAXIT = número máximo de iterações permitido

Fazer TOLX = tolerância

Fazer $C_1 = p_k \Phi(\Delta U_k)$

Fazer TOL=C1

Fazer $\Delta U_{k+1} = \Delta U_k + \alpha_k p_k$

Calcular $\Phi(\Delta U_{k+1})$

Fazer $C_2 = p_k \Phi(\Delta U_{k+1})$

Se $|C_1| < |C_2|$, fazer

$$\alpha_k = \alpha_1$$

$$\alpha_L = \alpha_2$$

$$SWAP = C1$$

$$C1 = C2$$

$$C2 = SWAP$$

Se não

$$\alpha_L = \alpha_1$$

$$\alpha_k = \alpha_2$$

Fim

Fazer j = 1, MAXIT

$$\delta\alpha = \frac{(\alpha_L - \alpha_k) \cdot C_2}{(C_2 - C_1)}$$

$$\alpha_L = \alpha_k$$

$$C_1 = C_2$$

$$\alpha_k = \alpha_k + \delta\alpha$$

$$\Delta U_{k+1} = \Delta U_k + \alpha_k p_k$$

Calcular $\Phi(\Delta U_{k+1})$

$$C_2 = p_k \cdot \Phi(\Delta U_{k+1})$$

Se $|\delta\alpha| < TOLX$ ou $|C_2| < |TOL|$, finalizar a rotina (critério de convergência satisfeito).

Fim

5.3. Algoritmos para a resolução da equação constitutiva

Nessa seção, são apresentados algoritmos que podem ser utilizados para resolver a equação constitutiva do problema de dano e ganho de rigidez. Depois de calculado o incremento de deslocamento Δu , é calculado o incremento de deformação $\Delta \varepsilon$ e atualizam-se as deformações totais ε . Por meio da equação constitutiva, σ está relacionado com ε , conforme apresentado na Equação (3.15). As tensões obtidas são puramente elásticas.

Pretende-se encontrar os incrementos de forças termodinâmicas $(\Delta A_d, \Delta A_h)$ relacionados com o incremento de deformações total $\Delta \varepsilon = \mathcal{D} \Delta u$.

A condição necessária e suficiente para que o vetor $(\Delta A_d, \Delta A_h)$ seja solução do problema proposto é:

$$(-\bar{\nabla} j_C(\Delta A_d), -\bar{\nabla} j_C(\Delta A_h)) \in \partial \text{Ind}_P(A_d + \Delta A_d, A_h + \Delta A_h) \quad (5.31)$$

Para o caso em que P é a região identificada por meio de m funções convexas, a condição apresentada na Equação (5.31) é determinada pelo seguinte sistema:

$$-\bar{\nabla} j_C(\Delta A_d) = \nabla_{A_d} f(A_d + \Delta A_d, A_h, \sigma) \quad (5.32)$$

$$-\bar{\nabla} j_C(\Delta A_h) = \nabla_{A_h} f(A_h + \Delta A_h, A_d, \sigma) \quad (5.33)$$

$$f(A_d + \Delta A_d, A_h + \Delta A_h, \sigma) \leq 0 \quad (5.34)$$

$$\Delta \lambda \geq 0 \quad (5.35)$$

$$f(A_d + \Delta A_d, A_h + \Delta A_h, \sigma) \cdot \Delta \lambda = 0 \quad (5.36)$$

Caso existam relações entre as forças termodinâmicas e os multiplicadores de Lagrange $\Delta \lambda$, relações que informam a evolução das tensões generalizadas admissíveis, elas podem ser escritas como:

$$A_d + \Delta A_d = \bar{A}_d(\Delta \lambda) \quad (5.37)$$

$$A_h + \Delta A_h = \bar{A}_h(\Delta \lambda) \quad (5.38)$$

É possível simplificar o sistema de Equações (5.32) a (5.38) sob a seguinte forma:

$$f(\Delta \lambda) \leq 0 \quad \text{ou} \quad F(\Delta \lambda) \geq 0, \quad \text{onde} \quad F = -f \quad (5.39)$$

$$\Delta \lambda \geq 0 \quad (5.40)$$

$$f(\Delta \lambda) \cdot \Delta \lambda = 0 \quad (5.41)$$

O problema apresentado nas Equações (5.39) a (5.41) é denominado problema de complementaridade não linear. Um dos enfoques utilizados para resolver esse tipo de problema consiste em resolver uma seqüência de subproblemas de complementaridade linear. Isto é, dado $\Delta \lambda^k$, obtém-se $\Delta \lambda^{k+1}$ a partir da resolução do subproblema de complementaridade linear:

$$\Delta \lambda \geq 0 \quad (5.42)$$

$$w = F(\Delta \lambda^k) + \Theta(\Delta \lambda^k)(\Delta \lambda - \Delta \lambda^k) \geq 0 \quad (5.43)$$

$$\Delta \lambda^T \cdot w = 0 \quad (5.44)$$

Diferentes métodos podem ser empregados para resolver o problema de complementaridade não linear segundo o enfoque apresentado. A diferença entre esses métodos encontra-se na maneira como a matriz $\Theta(\Delta \lambda^k)$ é definida e atualizada a cada iteração. No Método de Newton, por exemplo, a matriz $\Theta(\Delta \lambda^k)$ é a matriz Jacobiana

$\nabla F(\Delta\lambda^k)$. Já no método de Quase-Newton, a matriz Jacobiana é substituída por uma aproximação atualizada a cada iteração por meio, por exemplo, da fórmula BFGS. O quadro 4 apresenta um algoritmo para resolver o problema de complementaridade não linear.

Quadro 4 - ALGORITMO PARA RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE COMPLEMENTARIDADE NÃO LINEAR

1. Inicializar $\Delta\lambda^k$
2. Calcular $\nabla F(\Delta\lambda^k)$
3. Enquanto $\|(\Delta\lambda^k)\| - \|(\Delta\lambda^{k-1})\| > \varepsilon$:

Obter $\Delta\lambda^{k+1}$ a partir da resolução do subproblema de complementaridade linear:

$$\Delta\lambda \geq 0, w = F(\Delta\lambda^k) + \Theta(\Delta\lambda^k)(\Delta\lambda - \Delta\lambda^k) \geq 0, \Delta\lambda^T \cdot w = 0$$

Calcular $\bar{A}_d(\Delta\lambda^{k+1})$

Calcular $\bar{A}_h(\Delta\lambda^{k+1})$

Calcular $F(\Delta\lambda^{k+1})$

Calcular $\nabla F(\Delta\lambda^{k+1})$

Atualizar k , isto é, $k = k + 1$

Fim

O subproblema de complementaridade linear pode ser resolvido através de métodos que, a partir de um número finito de iterações, conduzem a uma solução exata do problema, como, por exemplo, o Método de Lemke ou Newton Raphson.

É importante ressaltar que, quando a região P das tensões e forças termodinâmicas admissíveis é definida através de uma única função de escoamento, o problema de programação matemática obtido pode ser resolvido de forma mais simples. Sendo conhecido o estado atual de tensões e forças termodinâmicas admissíveis (σ, A_d, A_h) e um dado incremento $\Delta\varepsilon$, se:

$$f(A_d + \Delta A_d, A_h + \Delta A_h, \sigma) \leq 0 \quad (5.45)$$

não ocorre um estado inadmissível de tensões generalizadas e

$$\Delta\lambda = 0 \quad (5.46)$$

Logo:

$$\sigma = D(\alpha_h, \alpha_d) \cdot \varepsilon \quad (5.47)$$

$$A_h = \frac{1}{2}(1 - \alpha_d)\varepsilon \cdot D^0 \cdot \varepsilon \quad (5.48)$$

$$A_d = \frac{1}{2}(1 + \alpha_h)\varepsilon \cdot D^0 \cdot \varepsilon \quad (5.49)$$

A situação em que se tem um estado inadmissível de tensões generalizadas, identificada através de:

$$f(A_d + \Delta A_d, A_h + \Delta A_h, \sigma) > 0 \quad (5.50)$$

recai em um problema de encontrar a menor raiz positiva da equação não linear:

$$f(\Delta\lambda) = 0 \quad (5.51)$$

O Método de Newton-Raphson pode ser utilizado para resolver o problema. No Quadro 5, apresenta-se o algoritmo de Newton-Raphson empregado na solução de problemas envolvendo materiais com comportamento elasto-idealmente-plástico e critério de escoamento definido por uma única função.

A função de escoamento $f(\Delta\lambda)$, presente no Quadro 5, é definida com o auxílio das funções apresentadas nas Equações (5.52) e (5.53).

$$A_d + \Delta A_d = \bar{A}_d(\Delta\lambda) \quad (5.52)$$

$$A_h + \Delta A_h = \bar{A}_h(\Delta\lambda) \quad (5.53)$$

Quadro 5 – ALGORITMO DE NEWTON-RAPHSON PARA PROBLEMAS ENVOLVENDO MATERIAIS COM DANO E GANHO DE RIGIDEZ E CRITÉRIO DE EVOLUÇÃO DA REGIÃO P DEFINIDO POR UMA ÚNICA FUNÇÃO DE ESCOAMENTO.

| |
|--|
| 1. Calcular $\sigma, A_d, A_h, f(\sigma, A_d, A_h)$ |
| 2. Se $f(\sigma, A_d, A_h) \geq 0$ |
| $k = 0, \Delta\lambda^k = 0$ |
| Enquanto $\frac{f(\Delta\lambda^k)}{\nabla f(\Delta\lambda^k)} > \varepsilon$ |
| $\Delta\lambda^{k+1} = \Delta\lambda^k - \frac{f(\Delta\lambda^k)}{\nabla f(\Delta\lambda^k)}$ |
| $k = k + 1$ |
| Calcular $\bar{A}_d(\Delta\lambda^{k+1})$ |
| Calcular $\bar{A}_h(\Delta\lambda^{k+1})$ |
| Calcular $f(\Delta\lambda^{k+1})$ |

| |
|--|
| Calcular $\nabla f(\Delta\lambda^{k+1})$ |
| Fim |
| Fim |
| Fim |

5.4. Aplicação do Algoritmo de Newton-Raphson para o modelo de dano e recuperação da rigidez com uma função escoamento

Nessa seção, a função de escoamento representada por Cuomo no artigo de 2006 é reescrita e tomada como uma função quadrática, a fim de facilitar a obtenção de uma relação entre tensões e multiplicadores de Lagrange da forma apresentada na Equação (5.54). A equação para a determinação do gradiente da função de escoamento também é apresentada sob a forma especificada no algoritmo de programação matemática (Newton-Raphson) apresentado anteriormente.

A função de escoamento para o modelo do Cuomo é dada pela equação:

$$f(\sigma, A^d) = \alpha I_1(\sigma) + \beta \sqrt{J_2(\sigma)} + A^d - A^{d0} = 0 \quad (5.54)$$

Onde J_2 é o segundo invariante do tensor de tensões desviador, I_1 é o primeiro invariante do tensor de tensões, A^{d0} é a força termodinâmica de dano inicial e α, β são parâmetros do material.

$$J_2 = \frac{1}{3}(\sigma_{11}^2 + \sigma_{22}^2 + \sigma_{33}^2) - \frac{1}{3}(\sigma_{11}\sigma_{22} + \sigma_{11}\sigma_{33} + \sigma_{22}\sigma_{33}) - (\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2) \quad (5.55)$$

$$I_1 = tr(\sigma) = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} \quad (5.56)$$

Na formulação adotada nesta dissertação foi incluída na equação do Cuomo as forças termodinâmicas de ganho. E foi adotada uma força termodinâmica inicial de ganho maior que a força termodinâmica inicial de dano. A equação ficou então:

$$f(\sigma, A^d, A^h) = \alpha I_1(\sigma) + \beta \sqrt{J_2(\sigma)} + A^d - A^{d0} + A^h - A^{h0} = 0 \quad (5.57)$$

Esta equação pode ser reescrita como:

$$\beta \sqrt{J_2(\sigma)} = -\alpha I_1(\sigma) - (A^d - A^{d0}) - (A^h - A^{h0}) \quad (5.58)$$

E pode-se tomar a forma quadrática da mesma elevando ao quadrado ambos os lados da equação, retirando assim o segundo invariante da raiz quadrada:

$$\beta^2 J_2 = \alpha^2 I_1^2 + 2\alpha I_1[(A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0})] + (A^d - A^{d0})^2 + 2(A^d - A^{d0})(A^h - A^{h0}) + (A^h - A^{h0})^2 \quad (5.59)$$

Agrupando os últimos 3 termos da direita e substituindo na equação, tem-se:

$$\beta^2 J_2 = \alpha^2 I_1^2 + 2\alpha I_1 [(A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0})] + [(A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0})]^2 \quad (5.60)$$

Os invariantes do tensor de tensões (I_1) e do tensor de tensões desviador (J_2) podem ser reescritos sob as seguintes formas:

$$J_2 = \frac{1}{2} M \sigma \cdot \sigma \quad (5.61)$$

$$I_1 = G \sigma \quad (5.62)$$

Onde:

$$M = \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{bmatrix} \quad (5.63)$$

$$G = [1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0]^T \quad (5.64)$$

O quadrado do primeiro invariante do tensor de tensões pode ser reescrito como:

$$(I_1)^2 = J \sigma \cdot \sigma \quad (5.65)$$

Onde:

$$J = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.66)$$

Assim, a função de escoamento assume a forma:

$$\frac{1}{2} (\beta^2 M - 2\alpha^2 J) \sigma \cdot \sigma - 2\alpha G \sigma [(A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0})] - [(A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0})]^2 = 0 \quad (5.67)$$

E, finalmente, denominando a matriz $(\beta^2 M - 2\alpha^2 J)$ de matriz Q e o termo $-2\alpha G$ de \bar{G} , obtém-se:

$$f = \frac{1}{2} Q \sigma \cdot \sigma + \bar{G} \sigma [(A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0})] - [(A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0})]^2 = 0 \quad (5.68)$$

Dessa forma, a região admissível passa a ser representada por:

$$P = \left\{ \sigma, A^d, A^h / \frac{1}{2} Q \sigma \cdot \sigma + \bar{G} \sigma [(A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0})] - [(A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0})]^2 \leq 0 \right\} \quad (5.69)$$

As forças termodinâmicas de dano e ganho em função do multiplicador de Lagrange podem ser obtidas a partir das equações:

$$-\nabla_{j_c}^d(\Delta\sigma, \Delta A^d, \Delta A^h) = \nabla_{A^d} f(\sigma + \Delta\sigma, A^d + \Delta A^d, A^h + \Delta A^h) \Delta\lambda \quad (5.70)$$

$$-\nabla_{j_c}^h(\Delta\sigma, \Delta A^d, \Delta A^h) = \nabla_{A^h} f(\sigma + \Delta\sigma, A^d + \Delta A^d, A^h + \Delta A^h) \Delta\lambda \quad (5.71)$$

onde:

$$-\Delta\alpha_d = -\nabla_{j_c}^d = -k \frac{(\bar{\sigma} D^{-1} \bar{\sigma})^{\frac{1}{3}} \bar{A}^{\frac{1}{3}}}{\bar{A}^{\frac{2}{3}}} + k \frac{(\sigma D^{-1} \sigma)^{\frac{1}{3}} A^{\frac{1}{3}}}{A^{\frac{2}{3}}} \quad (5.72)$$

$$-\Delta\alpha_h = -\nabla_{j_c}^h = -k \frac{(\bar{\sigma} D^{-1} \bar{\sigma})^{\frac{1}{3}} \bar{A}^{\frac{1}{3}}}{\bar{A}^{\frac{2}{3}}} + k \frac{(\sigma D^{-1} \sigma)^{\frac{1}{3}} A^{\frac{1}{3}}}{A^{\frac{2}{3}}} \quad (5.73)$$

Serão consideradas de agora em diante as igualdades a seguir. A tensão não é função dos multiplicadores de Lagrange.

$$\sigma + \Delta\sigma = \bar{\sigma} \quad (5.74)$$

$$A^d + \Delta A^d = \bar{A}^d(\Delta\lambda) \quad (5.75)$$

$$A^h + \Delta A^h = \bar{A}^h(\Delta\lambda) \quad (5.76)$$

Os incrementos das variáveis internas de perda e do ganho de rigidez em função do multiplicador de Lagrange podem ser obtidos pelas seguintes equações:

$$-\Delta\alpha_d = \nabla_{A^d} f(\sigma + \Delta\sigma, A^d + \Delta A^d, A^h + \Delta A^h) \Delta\lambda \quad (5.77)$$

$$-\Delta\alpha_h = \nabla_{A^h} f(\sigma + \Delta\sigma, A^d + \Delta A^d, A^h + \Delta A^h) \Delta\lambda \quad (5.78)$$

A derivada de f em relação às forças termodinâmicas é:

$$\nabla_{A^d} f(\Delta\lambda) = \nabla_{A^h} f(\Delta\lambda) = \bar{G} \bar{\sigma} - 2[(\bar{A}^d - A^{d0}) + (\bar{A}^h - A^{h0})] \quad (5.79)$$

Substituindo as equações (5.72) e (5.73) nas equações (5.77) e (5.78) pode-se encontrar as forças termodinâmicas isolando-as nas equações. As forças termodinâmicas de ganho de rigidez e de dano são simétricas uma em relação à outra. A seguir é apresentada a equação da força termodinâmica de dano, a força termodinâmica de ganho é igual, a diferença é que basta apenas substituir onde se tem A^d , \bar{A}^d por A^h , \bar{A}^h e onde se tem A^h , \bar{A}^h troca-se por A^d , \bar{A}^d respectivamente.

$$\bar{A}^d = \left(\frac{\chi}{6\Delta\lambda} - \frac{V\bar{A}^{\frac{1}{3}}}{\chi} \right)^2 \quad (5.80)$$

onde

$$\chi = \left(\left(54Q + 6\sqrt{3} \sqrt{\frac{2V^3 \bar{A}^h + 27Q^2 \Delta\lambda}{\Delta\lambda}} \right) \Delta\lambda^2 \right)^{\frac{1}{3}} \quad (5.81)$$

$$V = -k(\bar{\sigma} D_0 \bar{\sigma})^{\frac{1}{3}} \quad (5.82)$$

$$Q = \frac{-k(\sigma D_0 \sigma)^{\frac{1}{3}} \bar{A}^h}{(A^d)^{\frac{2}{3}}} + \bar{G} \bar{\sigma} \Delta\lambda + 2\Delta\lambda (A^{d0} - \bar{A}^h + A^{h0}) \quad (5.83)$$

Utilizando as equações (5.74), (5.75) e (5.76), a função de tensões generalizadas admissíveis passa a ser definida por:

$$f(\Delta\lambda) = \frac{1}{2} Q \bar{\sigma} \cdot \bar{\sigma} + \bar{G} \bar{\sigma} [(\bar{A}^d - A^{d0}) + (\bar{A}^h - A^{h0})] - [(\bar{A}^d - A^{d0}) + (\bar{A}^h - A^{h0})]^2 = 0 \quad (5.84)$$

Nos casos em que não se tem admissibilidade de tensões generalizadas, isto é, nos casos em que:

$$f(\sigma, A^d, A^h) \geq 0 \quad (5.85)$$

o problema consiste em achar a menor raiz positiva da equação:

$$f(\Delta\lambda) = 0 \quad (5.86)$$

A determinação da menor raiz positiva da equação (5.86) pode ser realizada utilizando o método de Newton- Raphson, conforme descrito anteriormente. O algoritmo deste método envolve o cálculo do gradiente de f , que deve ser feito em relação ao multiplicador de Lagrange, ou seja, $\nabla_{\lambda} f(\Delta\lambda)$. A seguir é apresentado este gradiente.

$$\nabla_{\lambda} f(\Delta\lambda) = \frac{d}{d(\Delta\lambda)} \left\{ \frac{1}{2} Q \bar{\sigma} \cdot \bar{\sigma} + \bar{G} \bar{\sigma} [(\bar{A}^d - A^{d0}) + (\bar{A}^h - A^{h0})] - [(\bar{A}^d - A^{d0}) + (\bar{A}^h - A^{h0})]^2 \right\} \quad (5.87)$$

As únicas variáveis em função do multiplicador de Lagrange na equação (5.87) são as forças termodinâmicas de ganho e de dano, portanto, o cálculo da derivada de f se resume ao cálculo das derivadas das forças termodinâmicas. Após algum algebrismo pode-se escrever a equação (5.87) como:

$$\nabla_{\lambda} f(\Delta\lambda) = \left[\bar{G} \bar{\sigma} - 2(\bar{A}^d - A^{d0} + \bar{A}^h - A^{h0}) \right] \left\{ \frac{d(\bar{A}^d + \bar{A}^h)}{d(\Delta\lambda)} \right\} \quad (5.88)$$

Substituindo nas equações (5.77) e (5.78) os gradientes da função f e efetuando alguns algebrismos é possível obter:

$$\Delta\alpha_d = \left\{ \bar{G} \bar{\sigma} - 2[(\bar{A}^d - A^{d0}) + (\bar{A}^h - A^{h0})] \right\} \Delta\lambda \quad (5.89)$$

$$\Delta\alpha_h = \left\{ \bar{G} \bar{\sigma} - 2[(\bar{A}^d - A^{d0}) + (\bar{A}^h - A^{h0})] \right\} \Delta\lambda \quad (5.90)$$

5.5. Aplicação do Algoritmo de Newton-Raphson para o modelo de dano e recuperação da rigidez com duas funções de escoamento

Aplicando a mesma metodologia do item 5.4 e considerando duas funções de escoamento (5.91) e (5.92) tem-se:

$$f_1(\sigma, A^d) = \alpha_1 I_1(\sigma) + \beta_1 \sqrt{J_2(\sigma)} + \gamma_1 A^d - A^{d0} = 0 \quad (5.91)$$

$$f_2(\sigma, A^h) = \alpha_2 I_1(\sigma) + \beta_2 \sqrt{J_2(\sigma)} + \gamma_2 A^h - A^{h0} = 0 \quad (5.92)$$

Simplificando (5.72) e (5.73), para uma situação onde se tem apenas dissipação no plano das forças termodinâmicas de ganho e de perda de rigidez, respectivamente, obtem-se (5.93) e (5.94).

$$-\Delta\alpha_d = -\nabla_{\bar{J}_c}(\Delta A^d) = -k \sigma^{2/3} (A^h)^{1/3} [(\bar{A}^d)^{-2/3} - (A^d)^{-2/3}] \quad (5.93)$$

$$-\Delta\alpha_h = -\nabla_{\bar{J}_c}(\Delta A^h) = -k \sigma^{2/3} (A^d)^{1/3} [(\bar{A}^h)^{-2/3} - (A^h)^{-2/3}] \quad (5.94)$$

Os incrementos das variáveis internas da perda e do ganho em função do multiplicador de Lagrange podem ser obtidos pelas seguintes equações:

$$-\Delta\alpha_d = \nabla_{A^d} f_1 \Delta\lambda = \gamma_1 \Delta\lambda \quad (5.95)$$

$$-\Delta\alpha_h = \nabla_{A^h} f_2 \Delta\lambda = \gamma_2 \Delta\lambda \quad (5.96)$$

Igualando (5.93) com (5.95) e igualando (5.94) com (5.96) obtemos, respectivamente:

$$-k \sigma^{2/3} (A^h)^{1/3} [(\bar{A}^d)^{-2/3} - (A^d)^{-2/3}] = \gamma_1 \Delta\lambda \quad (5.97)$$

$$-k \sigma^{2/3} (A^d)^{1/3} [(\bar{A}^h)^{-2/3} - (A^h)^{-2/3}] = \gamma_2 \Delta\lambda \quad (5.98)$$

Isolando \bar{A}^d de (5.97) e \bar{A}^h de (5.98) obtemos:

$$\bar{A}^d = A^d(\Delta\lambda) = \left((A^d)^{-2/3} - \frac{\gamma_1 \Delta\lambda}{k \sigma^{2/3} (A^h)^{1/3}} \right)^{-3/2} \quad (5.99)$$

$$\bar{A}^h = A^h(\Delta\lambda) = \left((A^h)^{-2/3} - \frac{\gamma_2 \Delta\lambda}{k \sigma^{2/3} (A^d)^{1/3}} \right)^{-3/2} \quad (5.100)$$

Pode-se reescrever (5.91) e (5.92), em função do multiplicador de Lagrange ($\Delta\lambda$) e utilizando algumas das matrizes definidas no item 5.4 deste capítulo, como:

$$f_1(\Delta\lambda) = \frac{1}{2} Q \sigma \sigma + \bar{G} \sigma (\gamma_1 \bar{A}^d - A^{d0}) - (\gamma_1 \bar{A}^d - A^{d0})^2 = 0 \quad (5.101)$$

$$f_2(\Delta\lambda) = \frac{1}{2} Q \sigma \sigma + \bar{G} \sigma (\gamma_2 \bar{A}^h - A^{h0}) - (\gamma_2 \bar{A}^h - A^{h0})^2 = 0 \quad (5.102)$$

As derivadas das funções de escoamento em função do multiplicador de Lagrange podem ser escritas como:

$$\nabla_{\Delta\lambda} f_1(\Delta\lambda) = \frac{d[A^d(\Delta\lambda)]}{d(\Delta\lambda)} [\bar{G}\sigma\gamma_1 - 2\gamma_1(\gamma_1\bar{A}^d - A^{d0})] \quad (5.101)$$

$$\nabla_{\Delta\lambda} f_2(\Delta\lambda) = \frac{d[A^h(\Delta\lambda)]}{d(\Delta\lambda)} [\bar{G}\sigma\gamma_2 - 2\gamma_2(\gamma_2\bar{A}^h - A^{h0})] \quad (5.102)$$

A derivada das forças termodinâmicas explicitada nas Equações (5.101) e (5.102) são apresentadas nas Equações (5.103) e (5.104):

$$\frac{d[A^d(\Delta\lambda)]}{d(\Delta\lambda)} = \frac{3}{2} \left((A^d)^{-2/3} - \frac{\gamma_1 \Delta\lambda}{k\sigma^{2/3}(A^h)^{1/3}} \right)^{-5/2} \left(\frac{\gamma_1}{k\sigma^{2/3}(A^h)^{1/3}} \right) \quad (5.103)$$

$$\frac{d[A^h(\Delta\lambda)]}{d(\Delta\lambda)} = \frac{3}{2} \left((A^h)^{-2/3} - \frac{\gamma_2 \Delta\lambda}{k\sigma^{2/3}(A^d)^{1/3}} \right)^{-5/2} \left(\frac{\gamma_2}{k\sigma^{2/3}(A^d)^{1/3}} \right) \quad (5.103)$$

A evolução das variáveis internas, agora em termos do multiplicador de Lagrange, completa a formulação do algoritmo de Newton-Raphson:

$$\Delta\alpha_d = -\nabla_{\Delta\lambda} f_1(\Delta\lambda) \cdot \Delta\lambda \quad (5.104)$$

$$\Delta\alpha_h = -\nabla_{\Delta\lambda} f_2(\Delta\lambda) \cdot \Delta\lambda \quad (5.105)$$

5.6. Descrição do Programa Desenvolvido

Com base na formulação desenvolvida e apresentada neste trabalho, foram construídos dois programas de remodelamento ósseo, capazes de descrever o remodelamento ósseo para os casos unidimensionais (REMOLD 1D) e bidimensionais (REMOLD 2D).

Os programas foram desenvolvidos em linguagem de programação FORTRAN 90, utilizando os compiladores Compac Visual Fortran 6.5, Copyright[©] 2000 Compac Computer Corporation no sistema operacional Windows e o GFORTRAN 4.1 (GNU Fortran compiler, parte do GCC) no sistema operacional Linux.

Algumas rotinas de Elementos Finitos e de imposição das condições de contorno foram adaptadas de FREITAS, 2008. Considera-se que o material em análise é isotrópico, não havendo, no entanto, restrição quanto ao número de materiais que podem compor a estrutura analisada (osso trabecular, osso cortical, ligamentos, próteses, entre outros).

No módulo de pós-processamento os dados gerados no programa REMOLD 2D foram escritos diretamente em scripts VTK e a visualização das tensões generalizadas, deformações,

densidades e alfas foi feita no software Kitware ParaView versões 3.2.1 e 3.2.4 (Parallel Visualization application kitware). O pós-processamento da simulação com o código do REMOLD 1D foi feita utilizando rotinas do GNUPLOT.

Um resumo de como o programa desenvolvido é estruturado está apresentado na Figura 19.



Figura 19 – Forma como o programa desenvolvido encontra-se estruturado.

O fluxograma da subrotina de resolução do problema constitutivo utilizada nos programas REMOLD 1D e REMOLD 2D pode ser visualizada na Figura 20.

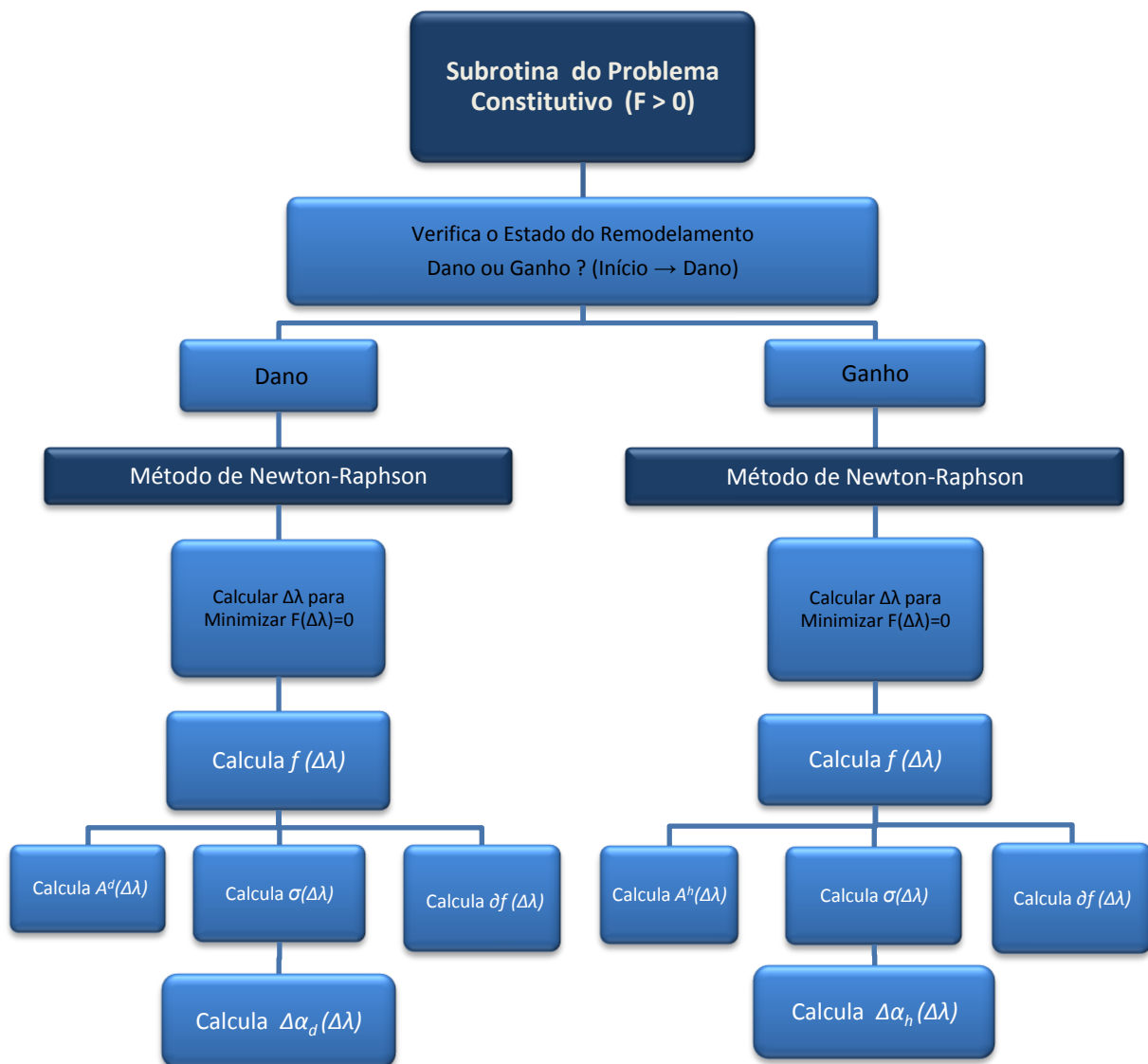


Figura 20 – Fluxograma da subrotina do problema constitutivo.

6. MODELAGEM

6.1. Simulações Realizadas

Foram realizadas três simulações: um exemplo unidimensional de um corpo de prova, um exemplo bidimensional de uma trabécula óssea e um exemplo bidimensional de um dente representando o movimento ortodôntico. A teoria desenvolvida nos capítulos anteriores é uma teoria geral e para a simulação foram consideradas algumas modificações dependendo do tipo de análise apresentado.

6.1.1. Exemplo unidimensional de um corpo de prova sobre tração

Neste exemplo será considerado um problema unidimensional representando o ensaio de tração de um corpo de prova ósseo conforme a Figura 21, com densidade independente das variáveis internas e carga concentrada (Q), aplicada de forma incremental em um determinado passo de tempo.

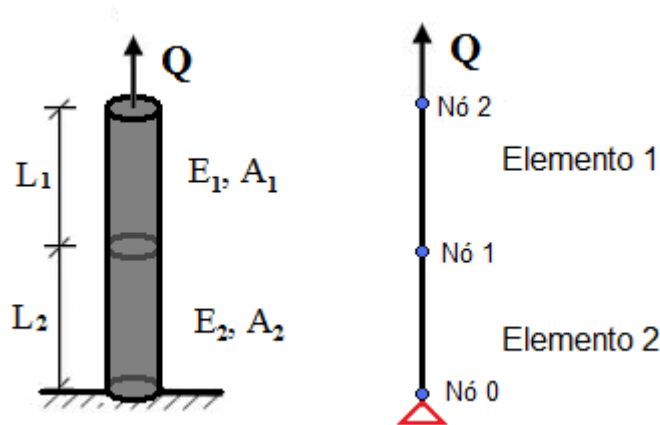


Figura 21 – Figura de dois elementos unidimensionais numa representação simplificada de um corpo de prova.

Considerando a densidade aparente variável em função das variáveis internas:

$$\rho_t = \rho(\alpha_d, \alpha_h) \quad (6.1)$$

A Energia Livre de Helmholtz para este caso unidimensional é representada na Equação (6.2) e considerando a direção de aplicação da carga como a direção x , tem-se:

$$\psi(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) = \frac{1}{2} E_0 (1 - \alpha_d)(1 + \alpha_h) \cdot \varepsilon_x^2 \quad (6.2)$$

$$\sigma(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) = E_0 (1 - \alpha_d)(1 + \alpha_h) \cdot \varepsilon_x \quad (6.3)$$

$$A^d(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) = -\frac{1}{2} [E_0(1 + \alpha_h)] \cdot \varepsilon_x^2 \quad (6.4)$$

$$A^h(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) = \frac{1}{2} [E_0(1 - \alpha_d)] \cdot \varepsilon_x^2 \quad (6.5)$$

A evolução do processo de remodelação óssea, ocorre basicamente em três fases, uma onde o material íntegro recebe o carregamento mas ainda permanece íntegro, outra onde aparecem as microfissuras e o microdano (perda de resistência) e outra onde o tecido ósseo sofre o processo de recuperação (ganho de resistência).

A caracterização destas fases depende de como serão definidas as variáveis internas e os potenciais, para que sejam consideradas as particularidades do processo de remodelação que variam de acordo com características específicas do tipo de osso, da espécie estudada e de outros fatores.

Supondo que cada uma das fases ocorre em subintervalos distintos, apresenta-se uma análise, com a definição em termos de diagramas tensão-deformação do que ocorre em cada fase do processo de remodelação óssea. As regiões das forças termodinâmicas admissíveis também são apresentadas.

Para todas as fases, as equações são obtidas a partir da substituição das variáveis internas nas equações (6.3) a (6.5).

A função de escoamento considerada é definida na equação (6.6).

$$f(\sigma, A^d, A^h) = \sigma + (A^d - A^{d0}) + (A^h - A^{h0}) \quad (6.6)$$

Para definir o potencial de dissipação é necessário determinar o potencial complementar, em função das variáveis duais. Dessa forma, como mostra a Equação (6.7), tem-se para o potencial complementar:

$$\psi_c(\sigma, A^d, A^h) = \sup_{\varepsilon, \alpha_d, \alpha_h} [\sigma \cdot \varepsilon_x - A^d \cdot \alpha_d + A^h \cdot \alpha_h - \frac{1}{2} E_0 (1 - \alpha_d)(1 + \alpha_h) \cdot \varepsilon_x^2] \quad (6.7)$$

ou, em função das variáveis duais, para um tempo t :

$$\psi_c(\sigma, A^d, A^h) = \sup_{\varepsilon, \alpha_d, \alpha_h} \left[\frac{3}{\sqrt[3]{2E_0}} (\sigma^2 A^d A^h)^{\frac{1}{3}} - A^d - A^h \right] \quad (6.8)$$

e ainda, para um tempo $t + \Delta t$:

$$\psi_c(\sigma + \Delta\sigma, A^d + \Delta A^d, A^h + \Delta A^h) = \sup_{\varepsilon + \Delta\varepsilon, \alpha_d + \Delta\alpha_d, \alpha_h + \Delta\alpha_h} \left[\frac{3}{\sqrt[3]{2E_0}} \left((\sigma + \Delta\sigma)^2 (A^d + \Delta A^d) (A^h + \Delta A^h) \right)^{\frac{1}{3}} - (A^d + \Delta A^d) - (A^h + \Delta A^h) \right] \quad (6.9)$$

O potencial de dissipação em incrementos é definido por:

$$\begin{aligned} \bar{j}_c(\Delta\sigma, \Delta A^d, \Delta A^h) &= \psi_c(\sigma + \Delta\sigma, A^d + \Delta A^d, A^h + \Delta A^h) - \Delta\sigma \nabla_{\sigma} \psi_c(\sigma, A^d, A^h) \\ &\quad - \Delta A^d \nabla_{A^d} \psi_c(\sigma, A^d, A^h) - \Delta A^h \nabla_{A^h} \psi_c(\sigma, A^d, A^h) - \psi_c(\sigma, A^d, A^h) \end{aligned} \quad (6.10)$$

Como na formulação será necessário trabalhar com os gradientes de \bar{j}_c e, de acordo com o *Teorema 4* da Análise Convexa descrito na Seção A.10 do Anexo A, o potencial \bar{j}_c pode ser definido como:

$$\begin{aligned} \bar{j}_c(\Delta\sigma, \Delta A^d, \Delta A^h) &= \left(\frac{3}{\sqrt[3]{2E_0}} (\sigma + \Delta\sigma)^{\frac{2}{3}} (A^d + \Delta A^d)^{\frac{1}{3}} (A^h + \Delta A^h)^{\frac{1}{3}} - (A^d + \Delta A^d) \right. \\ &\quad \left. - (A^h + \Delta A^h) \right) - \Delta\sigma \left(\frac{2}{\sqrt[3]{2E_0}} \sigma^{-\frac{1}{3}} (A^d)^{\frac{1}{3}} (A^h)^{\frac{1}{3}} \right) - \Delta A^d \left(\frac{1}{\sqrt[3]{2E_0}} \sigma^{\frac{2}{3}} (A^d)^{-\frac{2}{3}} (A^h)^{\frac{1}{3}} - 1 \right) \\ &\quad - \Delta A^h \left(\frac{1}{\sqrt[3]{2E_0}} \sigma^{\frac{2}{3}} (A^d)^{\frac{1}{3}} (A^h)^{-\frac{2}{3}} - 1 \right) - \left(\frac{3}{\sqrt[3]{2E_0}} \sigma^{\frac{2}{3}} (A^d)^{\frac{1}{3}} (A^h)^{\frac{1}{3}} - A^d - A^h \right) \end{aligned} \quad (6.11)$$

Os incrementos das variáveis internas de perda e ganho de rigidez são determinados por:

$$\begin{aligned} \Delta\alpha_d &= \nabla_{\Delta A^d} \bar{j}_c(\Delta\sigma, \Delta A^d, \Delta A^h) \\ \Delta\alpha_h &= \nabla_{\Delta A^h} \bar{j}_c(\Delta\sigma, \Delta A^d, \Delta A^h) \end{aligned} \quad (6.12)$$

que para o caso definido são:

$$\begin{aligned} \Delta\alpha_d &= \frac{1}{\sqrt[3]{2E_0}} \left((\sigma + \Delta\sigma)^{\frac{2}{3}} (A^d + \Delta A^d)^{-\frac{2}{3}} (A^h + \Delta A^h)^{\frac{1}{3}} - \sigma^{\frac{2}{3}} (A^d)^{-\frac{2}{3}} (A^h)^{\frac{1}{3}} \right) \\ \Delta\alpha_h &= \frac{1}{\sqrt[3]{2E_0}} \left((\sigma + \Delta\sigma)^{\frac{2}{3}} (A^d + \Delta A^d)^{\frac{1}{3}} (A^h + \Delta A^h)^{-\frac{2}{3}} - \sigma^{\frac{2}{3}} (A^d)^{\frac{1}{3}} (A^h)^{-\frac{2}{3}} \right) \end{aligned} \quad (6.13)$$

- **Fase inicial do material**

Na fase inicial do carregamento o material é considerado íntegro, logo: $\alpha_d = 0$ e $\alpha_h = 0$ e as forças termodinâmicas generalizadas são:

$$\begin{aligned}\sigma(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= E_0 \cdot \varepsilon_x \\ A^d(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2 \\ A^h(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2\end{aligned}\tag{6.14}$$

Observa-se que para a fase onde o material se encontra íntegro, com comportamento elástico linear, as forças termodinâmicas de perda e ganho de rigidez são iguais.

A Figura 22 mostra o diagrama tensão-deformação para a condição de material íntegro com a área escurecida indicando as forças termodinâmicas de perda e de ganho de rigidez.

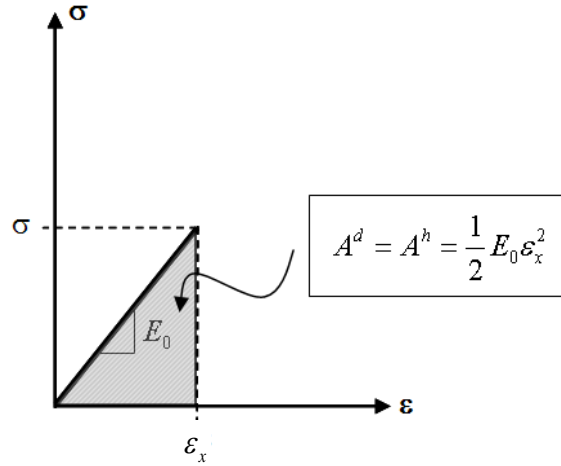


Figura 22 – Diagrama tensão-deformação para o material na fase inicial.

Substituindo-se em (6.6) as relações de (6.14), tem-se a função de escoamento como função das variáveis primais:

$$f(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) = E_0 \cdot \varepsilon_x - \left(\sigma_0 - \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2 + \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2 \right) = E_0 \cdot \varepsilon_x - \sigma_0\tag{6.15}$$

- **Fase de perda de rigidez do material**

Na fase de perda de rigidez aparecem os efeitos de microdano e microfissuração no

material, logo: $\alpha_d \neq 0$ e $\alpha_h = 0$ e as forças termodinâmicas generalizadas são:

$$\begin{aligned}\sigma(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= E_0(1 - \alpha_d) \cdot \varepsilon_x \\ A^d(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2 \\ A^h(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= \frac{1}{2} E_0(1 - \alpha_d) \cdot \varepsilon_x^2\end{aligned}\tag{6.16}$$

O diagrama da Figura 23 apresenta o comportamento do material que estava íntegro e nesta fase sofreu perda de rigidez.

As áreas escurecidas mostradas na Figura 23 representam as forças termodinâmicas de perda de rigidez (A^d) e de ganho de rigidez (A^h).

Observa-se que $A^d \geq A^h$ para qualquer valor de ε_x e que a força termodinâmica de perda de rigidez, para esta fase, também é determinada por:

$$A^d = \frac{1}{2} \tilde{\sigma} \varepsilon_x\tag{6.17}$$

com $\tilde{\sigma} = E_0 \varepsilon_x$ definida como a tensão efetiva do material.

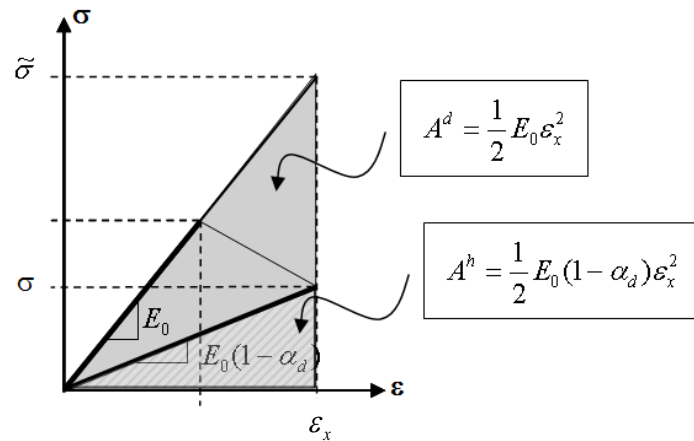


Figura 23 – Diagrama tensão-deformação para o material na fase de perda de rigidez.

Substituindo-se em (6.6) as relações de (6.16) tem-se a função de escoamento como função das variáveis primais:

$$\begin{aligned}
f(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= E_0 \cdot \varepsilon_x (1 - \alpha_d) - \left(\sigma_0 - \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2 + \frac{1}{2} E_0 (1 - \alpha_d) \cdot \varepsilon_x^2 \right) \\
&= E_0 \cdot \varepsilon_x (1 - \alpha_d) - \left(\sigma_0 - \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2 \alpha_d \right)
\end{aligned} \tag{6.18}$$

- **Fase de ganho de rigidez do material**

Na fase de ganho de rigidez aparecem os efeitos de reparação no material, logo: $\alpha_d = 0$ e $\alpha_h \neq 0$ e as forças termodinâmicas generalizadas são:

$$\begin{aligned}
\sigma(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= E_0 (1 + \alpha_h) \cdot \varepsilon_x \\
A^d(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= \frac{1}{2} E_0 (1 + \alpha_h) \cdot \varepsilon_x^2 \\
A^h(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2
\end{aligned} \tag{6.19}$$

O diagrama que define o comportamento do material que estava danificado e nesta fase sofreu ganho de rigidez é mostrado na Figura 24.

As áreas escurecidas mostradas na Figura 24 representam as forças termodinâmicas de perda de rigidez (A^d) e de ganho de rigidez (A^h).

Observa-se que $A^h \geq A^d$ para qualquer valor de ε_x e que a força termodinâmica de ganho de rigidez, para esta fase, também é determinada por:

$$A^h = \frac{1}{2} \tilde{\sigma} \varepsilon_x \tag{6.19}$$

com $\tilde{\sigma} = E_0 \varepsilon_x$ definida como a tensão efetiva do material.

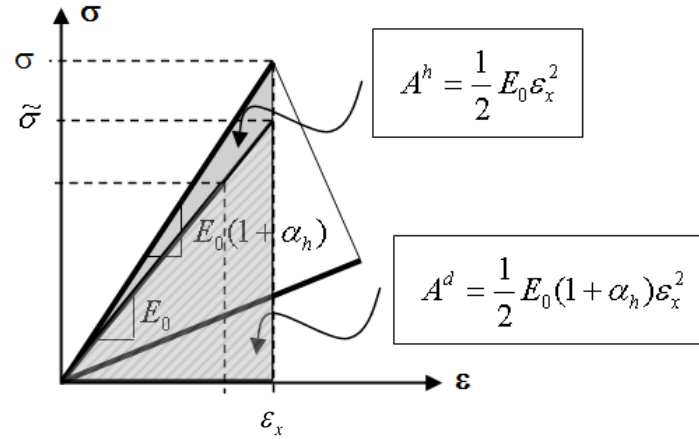


Figura 24 – Diagrama tensão-deformação para o material na fase de ganho de rigidez.

Substituindo-se as relações de (6.19) em (6.6) tem-se a função de escoamento como função das variáveis primais:

$$\begin{aligned}
 f(\varepsilon_x, \alpha_d, \alpha_h) &= E_0 \cdot \varepsilon_x (1 + \alpha_h) - \left(\sigma_0 - \frac{1}{2} E_0 (1 + \alpha_h) \cdot \varepsilon_x^2 + \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2 \right) \\
 &= E_0 \cdot \varepsilon_x (1 + \alpha_h) - \left(\sigma_0 - \frac{1}{2} E_0 \cdot \varepsilon_x^2 \alpha_h \right)
 \end{aligned} \tag{6.20}$$

6.1.2. Modelo bidimensional representando uma trabécula óssea com densidade dependente das variáveis internas

A modelagem de uma trabécula resume o que ocorre microscopicamente no remodelamento de um osso trabecular. A Figura 25 ilustra a estrutura de um osso esponjoso com um aumento de 40 vezes e o detalhe de uma trabécula. O osso esponjoso consiste numa rede de osso fino com espaços vazios no seu interior, as estruturas que não são espaços vazios são chamadas de trabéculas. A sua orientação é afetada pelas cargas mecânicas a que o osso está sujeito.

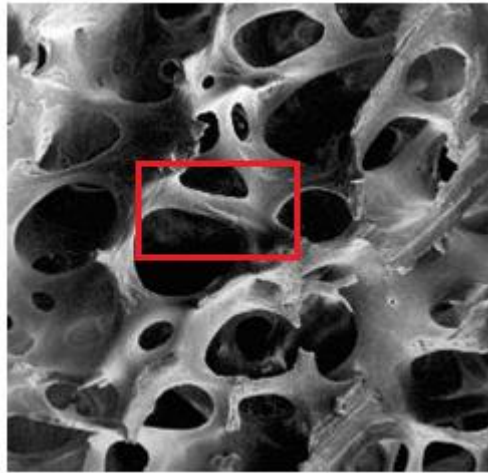


Figura 25 – Estrutura do osso esponjoso. Detalhe em vermelho mostrando uma trabécula óssea (Adaptado de Simões, 2008).

A modelagem simplificada desta trabécula pode ser entendida melhor na Figura 26, onde cargas de compressão afetam a estrutura engastada no lado esquerdo.

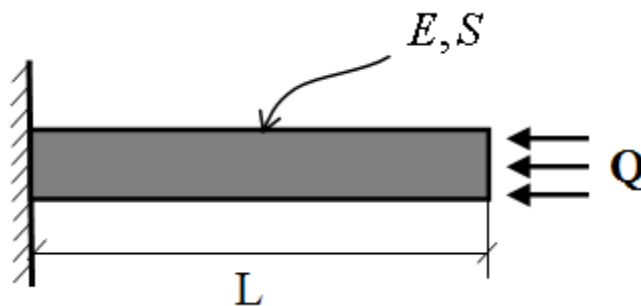


Figura 26 – Modelo bidimensional de uma Trabécula.

A malha utilizada, assim como as condições de contorno pode ser observada na Figura 27. Em vermelho estão as restrições ao movimento em x, conhecidas como condições de contorno de Dirichlet. As flexas indicam a tensão aplicada na área dos elementos, também chamada de condição de contorno de Neumann. A tensão aplicada foi igual a 1.0 MPa.

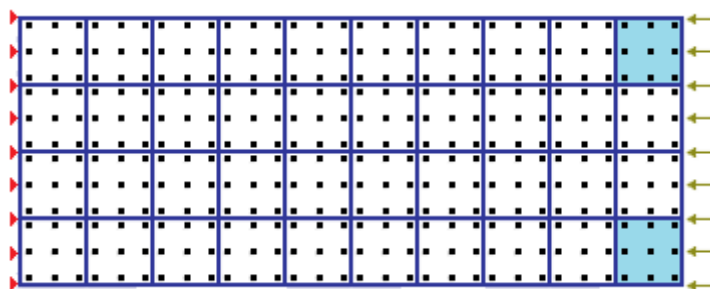


Figura 27 – Malha de Elementos Finitos, pontos de Gauss e condições de contorno.

O número de elementos utilizados na malha, assim como o número de passos de carga podem ser consultados na Tabela 3, onde estão os dados de entrada do programa.

Tabela 3 – Dados de Entrada do Programa.

| Dados de entrada do Programa | |
|--|-------|
| Número de Elementos | 40 |
| Número de Pontos de Integração de Gauss por Elemento | 9 |
| Número de Nós por Elemento | 8 |
| Numero de Passos de Carga | 200 |
| Fator que multiplica a Carga | 0.005 |

Na simulação os dois elementos com a cor azul clara da Figura 27 começaram danificados. O valor utilizado para o alfa de dano para cada um dos nove pontos de Gauss de cada elemento foi igual a $\alpha_d = 0.67$.

Tabela 4 – Parâmetros do Material

| Parâmetros do Material | |
|--|-----------|
| Módulo de Elasticidade | 1000 MPa |
| Coeficiente de Poisson | 0.25 |
| Parâmetro Material da função f – coeficiente μ | 0,000012 |
| Parâmetro Material da função f – coeficiente β | 0.0000039 |

Na Tabela 4 estão as propriedades do material utilizadas na simulação. Para a rigidez inicial da trabécula foi utilizado um valor encontrado na literatura (Kopperdahl e Keaveny, 1998).

6.1.3. Aplicações na Ortodontia – Modelo bidimensional representando um dente e o osso cortical ao seu redor – Modelo isotrópico

A representação geométrica do dente foi baseada em radiografias gentilmente cedidas pela dentista Érica Lopes Ferreira. O modelo geométrico do dente representa um incisivo central superior como é mostrado na Figura 28.



Figura 28 - Radiografia dos incisivos centrais superiores.

A imagem da radiografia foi trabalhada no software AutoCAD, onde foi possível extrair as coordenadas que delimitam o dente e o osso trabecular. A partir destas coordenadas foi gerada uma malha para um dente e o osso circunvizinho com o auxílio do software Ansys como mostra a Figura 29.

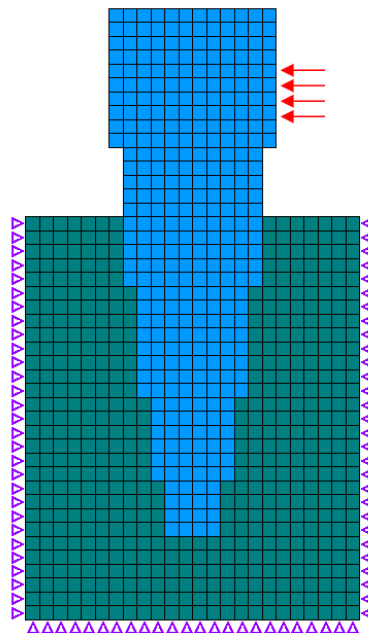


Figura 29 – Malha de Elementos Finitos com as condições de contorno de pressão em vermelho e de deslocamento zero em roxo.

Foi aplicada uma força de 1 N, que foi dividida em 400 passos de carga, ou seja, uma força de 0.0025 N por passo de carga. A força foi aplicada na coroa do dente no sentido vestibulo-lingual, gerando um movimento de inclinação do dente no mesmo sentido. A força

aplicada e as condições de contorno no osso trabecular (deslocamento zero em suas laterais e base) estão representadas na Figura 29. Neste modelo, serão consideradas apenas as tensões e deformações no osso adjacente ao dente, considerando que as forças já foram transferidas para o osso alveolar pelo ligamento periodontal, quando as tensões e deformações que se produzem na região óssea ativam processos de remodelação que resultam numa alteração permanente da posição do dente.

A malha utilizada no modelo contém 866 elementos quadrados com funções de interpolação quadráticas, 8 nós por elemento e 9 pontos de integração de Gauss por elemento. Ao todo existem 2739 nós e 7794 pontos de Gauss, onde são resolvidas todas as equações. Dos 866 elementos, 530 (em verde escuro na Figura 29) representam o osso trabecular e 336 (em azul na Figura 29) representam o dente incisivo central superior.

A seguir é apresentada a tabela das características materiais utilizadas no modelo:

Tabela 5 - Características Materiais do Modelo de Elementos Finitos.

| | Módulo de Young (MPa) | Coefficiente de Poisson |
|------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| Osso Trabecular | 0.027 | 0.32 |
| Dente (Dentina) | 0.06 | 0.35 |

A seguir serão apresentadas as características básicas do modelo isotrópico utilizado na simulação do remodelamento ósseo. Este modelo foi baseado no modelo isotrópico de Stanford (Jacobs, 1994 apud Rüberg, 2003) e em algumas considerações de McNamara, 2007.

O algoritmo desenvolvido para modelar o processo de remodelamento deve seguir algumas etapas. O problema de equilíbrio é resolvido em passos de carga e para o primeiro passo de carga considera-se o dente e o osso trabecular como material que obedece a teoria da elasticidade.

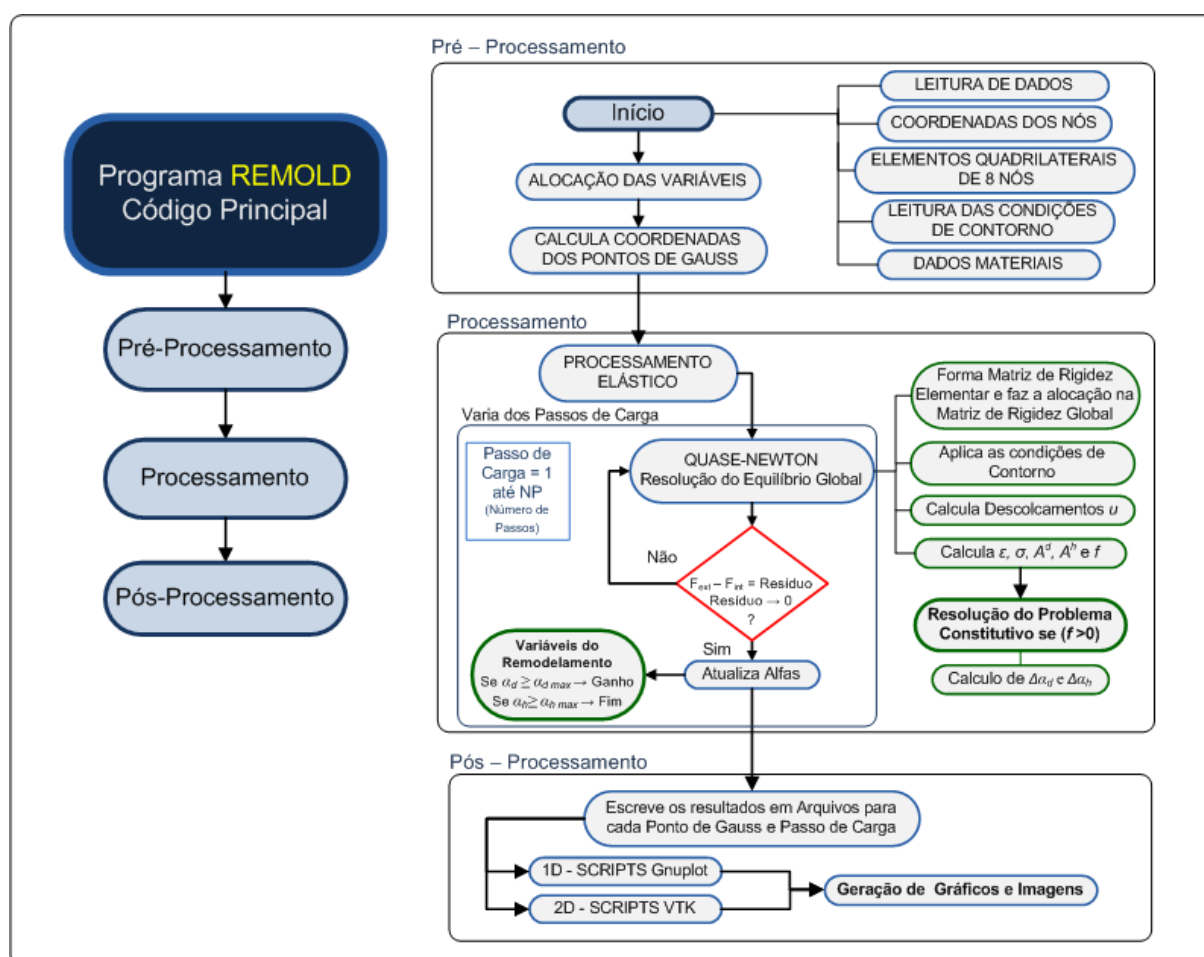
Para cada passo de carga (i) onde as equações são resolvidas nos pontos de Gauss (j) assim como as variáveis de deformação (ε), tensão (σ), deslocamento (u), os alfas (α_d, α_h) e o incremento de deformação ($\Delta\varepsilon$). As densidades (ρ), o módulo de Elasticidade ou Young (E) e o coeficiente de poisson (ν) são calculados para cada elemento da malha. O algoritmo para cada passo de carga pode ser resumido no Quadro 6.

A variável S_v é a área de superfície específica ou a densidade de superfície e representa a área de superfície interna por unidade de volume, é diretamente relacionada com a porosidade p pelo polinômio da Equação (6.22).

$$S_v = 0.02876p^5 - 0.10104p^4 + 0.13396p^3 - 0.09304p^2 + 0.03226p \quad (6.22)$$

Os gráficos das Figuras 30 e 31 representam as leis utilizadas para o ganho e perda óssea nos casos de tração e compressão. Em cada um dos casos (tração e compressão) é possível se obter ganho (*aumento da rigidez*) e/ou perda óssea (dano) de acordo com o nível de deformação apresentado. Os níveis utilizados neste trabalho são explicitados na Tabela 6. Nos gráficos as deformações estão representadas em *Micro Strain* (deformações micro = 10^{-6}), como adotado por Frost, 1960 e McNamara, L.M. Prendergast P.J., 2007.

Quadro 6 – ALGORITMO DE RESOLUÇÃO DO MODELO DESENVOLVIDO.



O quadro 6 está representando o algoritmo simplificado do modelo implementado. O Programa é dividido em 3 partes: o pré-processamento, o processamento e o pós processamento.

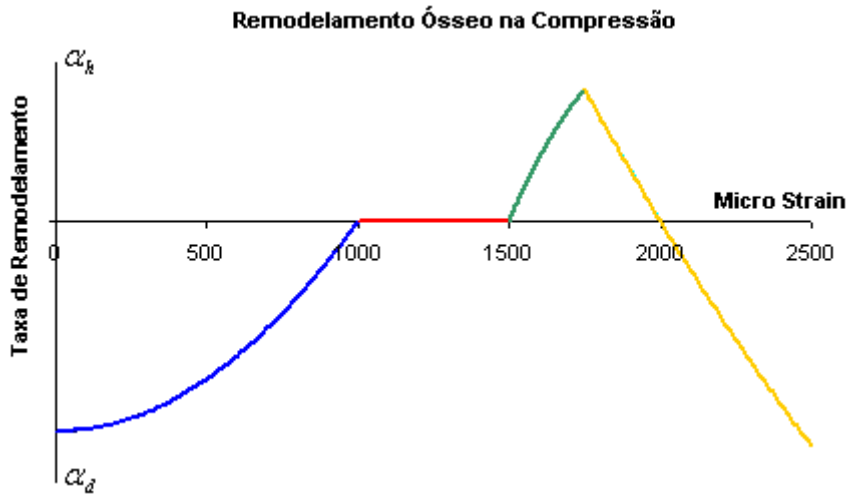


Figura 30 – Remodelamento ósseo na compressão.

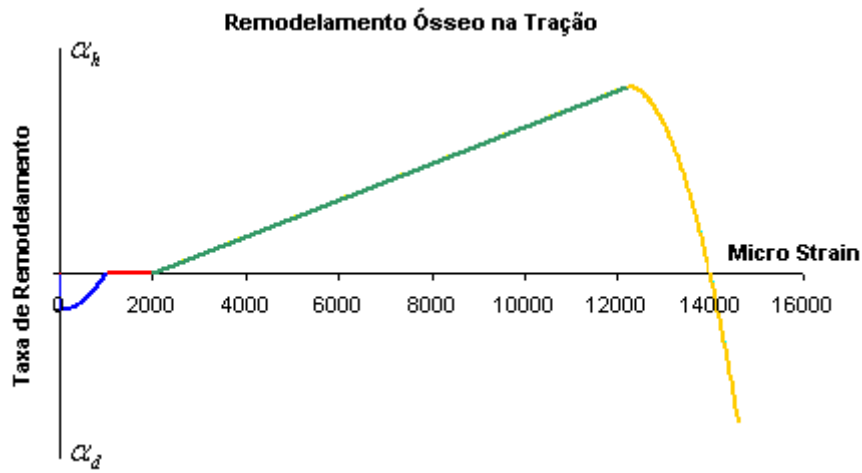


Figura 31 – Remodelamento ósseo na tração.

As leis representadas nas Figuras 31 e 32 podem ser escritas como funções que descrevem o comportamento do osso. A seguir são apresentadas 4 funções: f_d^t é a função de dano na tração, f_d^c é a função de dano na compressão, f_h^t é a função de ganho na tração e f_h^c é a função de ganho na compressão, $I_1(\sigma)$ representa o primeiro invariante do tensor de tensões.

$$f_d^t = I_1(\sigma) - A_{d0}^t \quad (6.23)$$

$$f_h^t = A_{h0}^t - I_1(\sigma) \quad (6.24)$$

$$f_d^c = I_1(\sigma) - A_{d0}^c \quad (6.25)$$

$$f_h^c = A_{h0}^c - I_1(\sigma) \quad (6.26)$$

Os valores de A_{d0}^t , A_{d0}^c , A_{h0}^t , A_{h0}^c representam as forças termodinâmicas iniciais de dano na tração e compressão e as forças termodinâmicas iniciais de ganho na tração e compressão, respectivamente. Elas são obtidas através das equações (6.27) até (6.30)

$$A_{d0}^t = \frac{\varepsilon_{d0}^t D \varepsilon_{d0}^t}{2} \quad (6.27)$$

$$A_{h0}^t = \frac{\varepsilon_{h0}^t D \varepsilon_{h0}^t}{2} \quad (6.28)$$

$$A_{d0}^c = \frac{\varepsilon_{d0}^c D \varepsilon_{d0}^c}{2} \quad (6.29)$$

$$A_{h0}^c = \frac{\varepsilon_{h0}^c D \varepsilon_{h0}^c}{2} \quad (6.30)$$

Os valores das deformações nas equações das forças termodinâmicas iniciais são os valores que nas Figuras 31 e 32 separam as zonas de dano e ganho das zonas mortas. A tabela a seguir apresenta os valores destas constantes retiradas de Mcnamara, et al. 2007.

Tabela 6 - Deformações que delimitam a zona morta para tração e compressão, valores em Micro Strain.

| ε_{d0}^c | ε_{h0}^c | ε_{d0}^t | ε_{h0}^t |
|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 1000.0 | 1500.0 | 1000.0 | 2000.0 |

7. RESULTADOS

A seguir são apresentados os resultados do modelo proposto. No item 7.1 estão os resultados do modelo unidimensional, no item 7.2 estão os resultados do modelo bidimensional de uma trabécula óssea. No item 7.3 é apresentado um exemplo aplicado à ortodontia.

7.1. Modelo unidimensional

A seguir são apresentados alguns resultados das simulações do modelo unidimensional representando um ensaio de tração. A Figura 32 é a mesma apresentada no capítulo da modelagem e representa o modelo simulado.

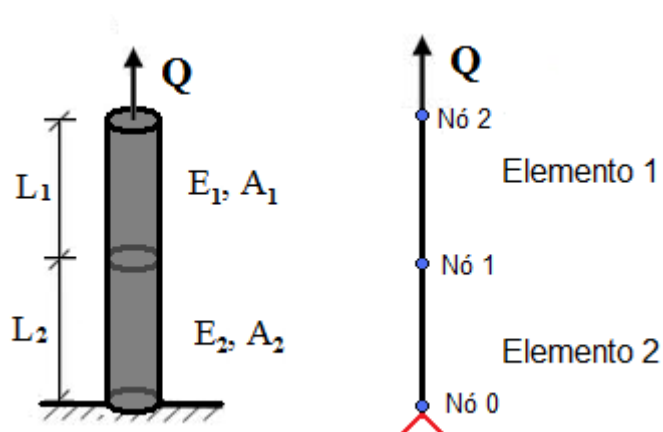


Figura 32 – Modelo unidimensional simulado.

Os parâmetros do corpo de prova, a largura de cada elemento L_1 e L_2 , a rigidez e a área de cada elemento E_1 , A_1 e E_2 , A_2 podem ser observados na Tabela 7.

Tabela 7 – Parâmetros materiais da simulação unidimensional.

| Parâmetro | Valor |
|-------------------------|-----------------------|
| L_1 (m) | 0.0125 |
| L_2 (m) | 0.0125 |
| A_1 (m ²) | $5.026 \cdot 10^{-5}$ |
| A_2 (m ²) | $5.026 \cdot 10^{-5}$ |

7.1.1. Rigidez inicial constante

A seguir são apresentados alguns resultados das simulações do modelo unidimensional com módulos de elasticidade iguais para os dois elementos. Os gráficos das Figuras 33, 34 e 35 representam o que aconteceu no remodelamento do Elemento 1 que foi idêntico ao Elemento 2.

A Figura 33 ilustra o diagrama de tensões e deformações para o Elemento 1, o processo de danificação ocorreu até uma deformação de menos de 2 %, em seguida o processo de recuperação de rigidez se processou.

Os parâmetros de entrada desta simulação podem ser observados na Tabela 8.

Tabela 8 – Parâmetros de entrada da simulação com rigidez inicial dos elementos constante.

| Parâmetro | Valor |
|---|----------|
| E_1 - Módulo de Elasticidade inicial – Elemento 1 (MPa) | 4.50 |
| E_2 - Módulo de Elasticidade inicial – Elemento 2 (MPa) | 4.50 |
| Número de Passos de Carga | 1000 |
| α_d inicial - Elemento 1 | 0.0 |
| α_d inicial - Elemento 2 | 0.0 |
| α_d max | 0.67 |
| α_h max | 1.0 |
| A^{d0} (MPa) | 969.61 |
| A^{h0} (MPa) | 10000.00 |

O processo de danificação aconteceu até o passo de carga 92, quando começou o processo de recuperação da rigidez como pode ser observado na Figura 34.

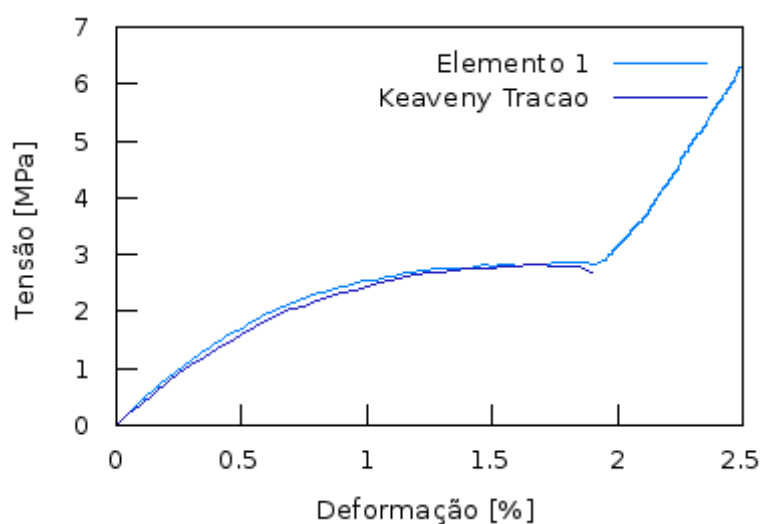


Figura 33 – Diagrama Tensão – Deformação para o Elemento 1.

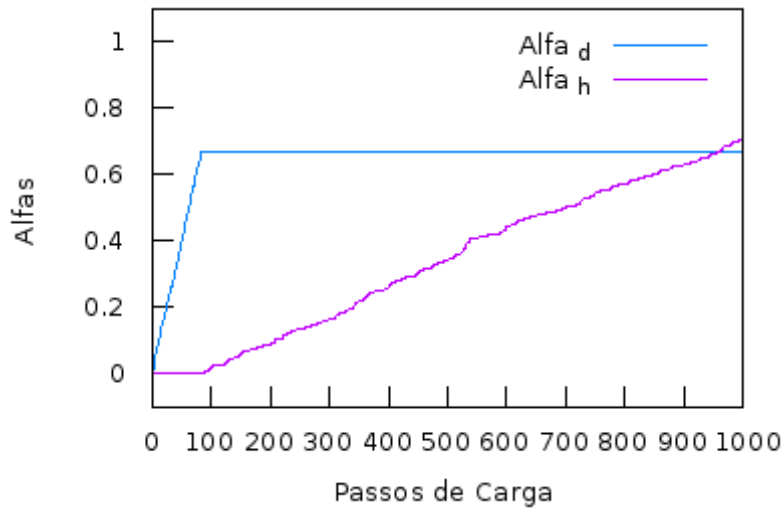


Figura 34 – Evolução das variáveis internas para o Elemento 1 com os passos de carga.

Observando a Figura 35 é possível observar que ao final da danificação o módulo de elasticidade inicial, 4.5 MPa, encontrava-se a um valor igual a 33% da rigidez inicial, enquanto que no final do processo de recuperação / ganho de rigidez ele encontrava-se a um valor de 55% da rigidez inicial.

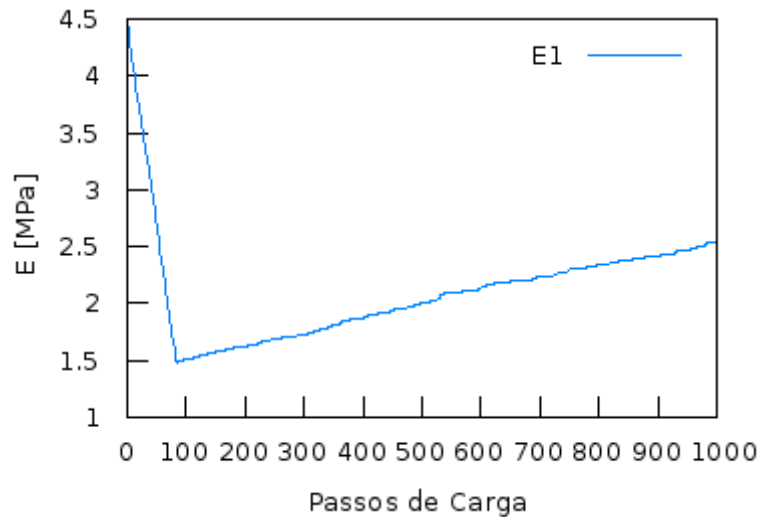


Figura 35 – Evolução do módulo de elasticidade do Elemento 1 com os passos de carga.

7.1.2. Dano inicial

As simulações do modelo unidimensional com módulos de elasticidade diferentes para os dois elementos são apresentadas nesta seção. Os gráficos das Figuras 36, 37 e 38 representam o que aconteceu no remodelamento do Elemento 1 que foi diferente ao remodelamento que aconteceu ao Elemento 2. Os gráficos desta seção mostram a evolução dos processos de danificação e ganho até o momento em que a variável interna de ganho de rigidez atingiu a unidade.

A Figura 36 ilustra o diagrama de tensões e deformações para os dois elementos, o processo de danificação ocorreu até uma deformação inferior a 2 % e, em seguida, o processo de recuperação de rigidez ocorreu.

Os parâmetros de entrada desta simulação podem ser observados na Tabela 9.

Tabela 9 – Parâmetros de entrada da simulação com rigidez inicial dos elementos constante.

| Parâmetro | Valor |
|---|--------------|
| E_1 - Módulo de Elasticidade inicial – Elemento 1 (MPa) | 4.50 |
| E_2 - Módulo de Elasticidade inicial – Elemento 2 (MPa) | 4.05 |
| Número de Passos de Carga | 800 |
| α_d inicial - Elemento 1 | 0.0 |
| α_d inicial - Elemento 2 | 0.1 |
| α_d max | 0.67 |
| α_h max | 1.0 |
| A^{d0} (MPa) | 969.61 |
| A^{h0} (MPa) | 10000.00 |

O processo de danificação terminou antes para o Elemento 2 e este elemento também foi o que apresentou maiores deformações ao final do processo de ganho de rigidez, como pode ser observado na Figura 36. As Figuras 37 e 38 apresentam a evolução das variáveis internas e do módulo de elasticidade, respectivamente, com relação aos passos de carga.

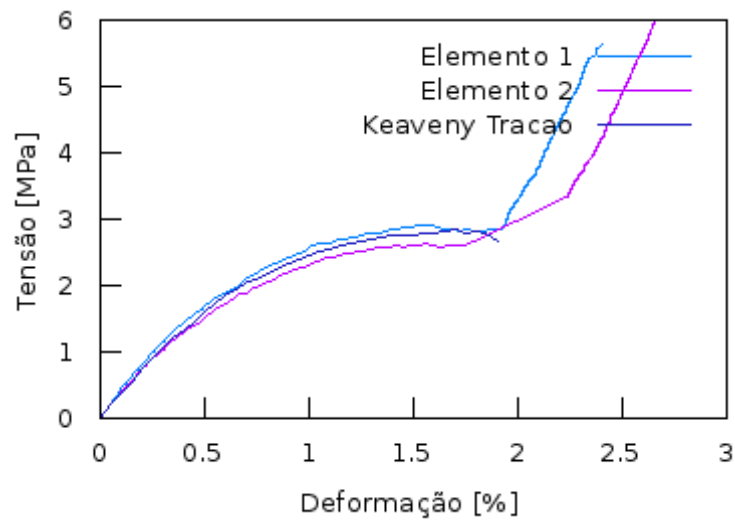


Figura 36 – Diagrama Tensão – Deformação para os Elementos 1 e 2.

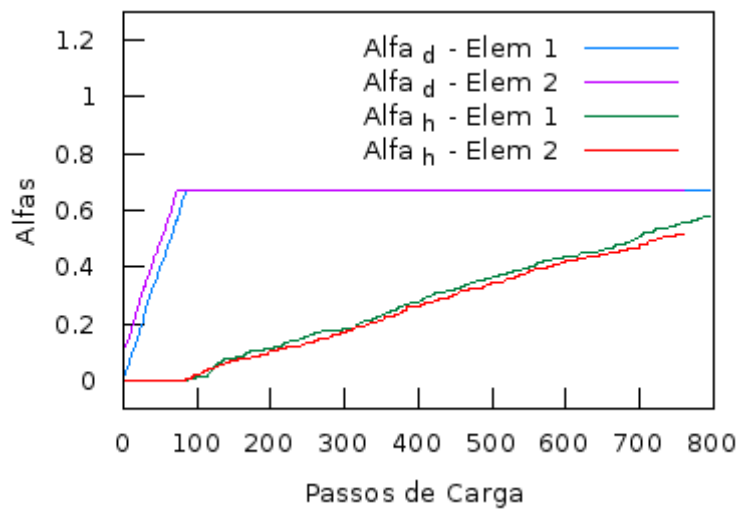


Figura 37 – Evolução das variáveis internas para os Elementos 1 e 2 com os passos de carga.

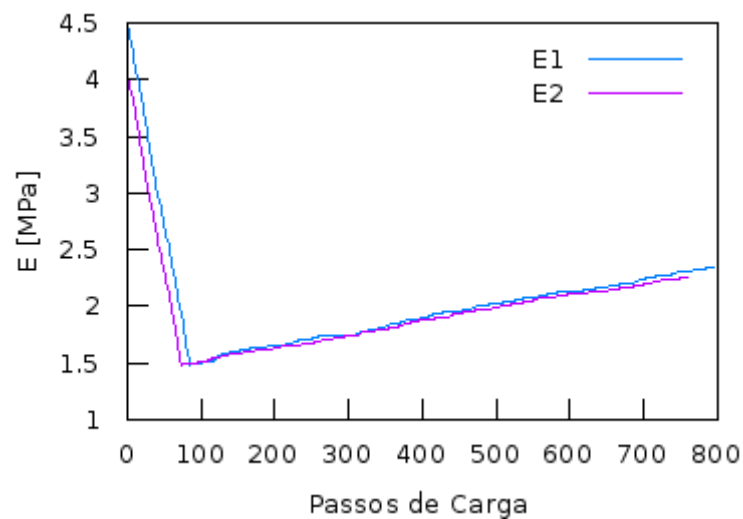


Figura 38 – Evolução do módulo de elasticidade para os Elementos 1 e 2 com os passos de carga.

7.2. Modelo bidimensional de uma Trabécula Óssea

A idéia da apresentação deste exemplo é a simulação de um processo celular que ocorre na microestrutura da matriz óssea. A ilustração da Figura 39 mostra o processo de remodelamento ósseo da ativação, reabsorção e formação óssea (Doblaré et al, 2004).

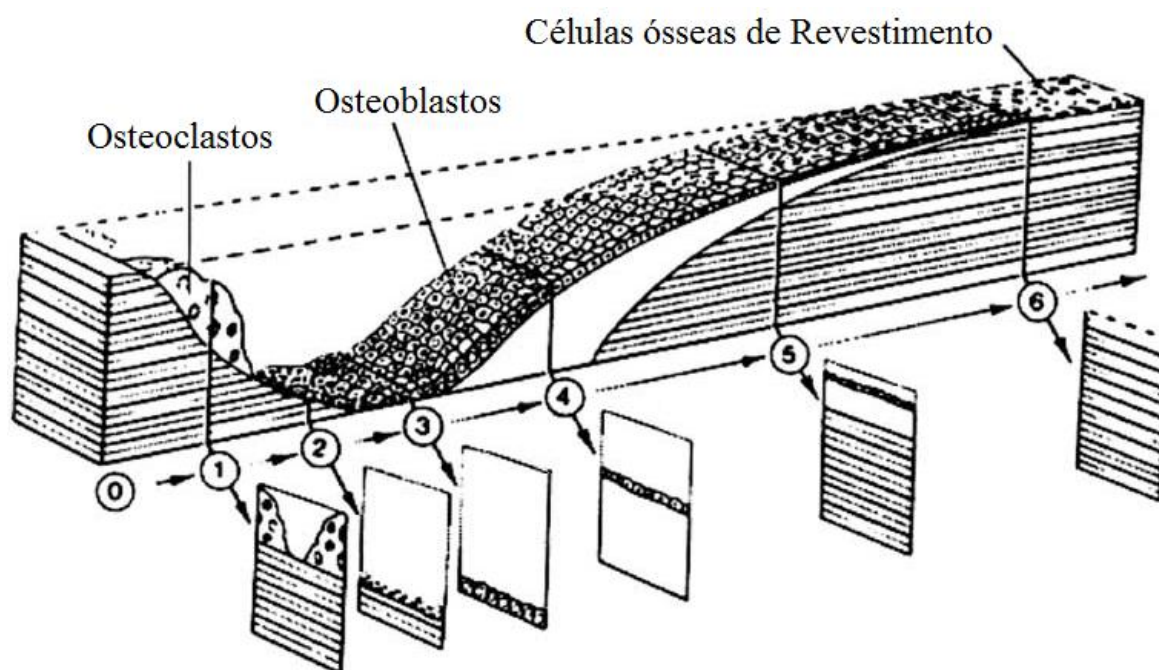


Figura 39 – Processo celular do remodelamento ósseo trabecular (Doblaré et al, 2004).

Os números variando de 0 até 6 na Figura 39 ilustram o processo de remodelamento ósseo e a camada de células ósseas sendo depositadas após a reabsorção óssea. A representação bidimensional simplificada de uma trabécula pode ser observada novamente na Figura 40.

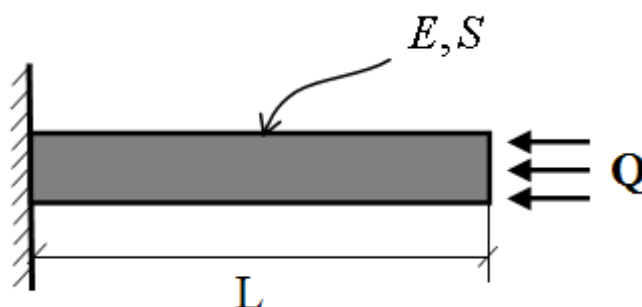


Figura 40 – Modelo bidimensional de uma trabécula óssea.

A distribuição das deformações na trabécula óssea pode ser visualizada nas Figuras 41, 42 e 43. As Figuras também mostram a evolução de alguns passos de carga.



Figura 41 – Distribuição das deformações na direção x do modelo bidimensional de uma trabécula óssea, passo de carga 30.

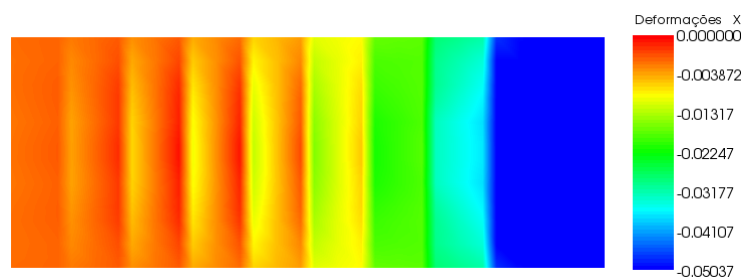


Figura 42 – Distribuição das deformações na direção x do modelo bidimensional de uma trabécula óssea, passo de carga 120.

A evolução da variável interna de dano pode ser visualizada na sequência de imagens da Figura 43.



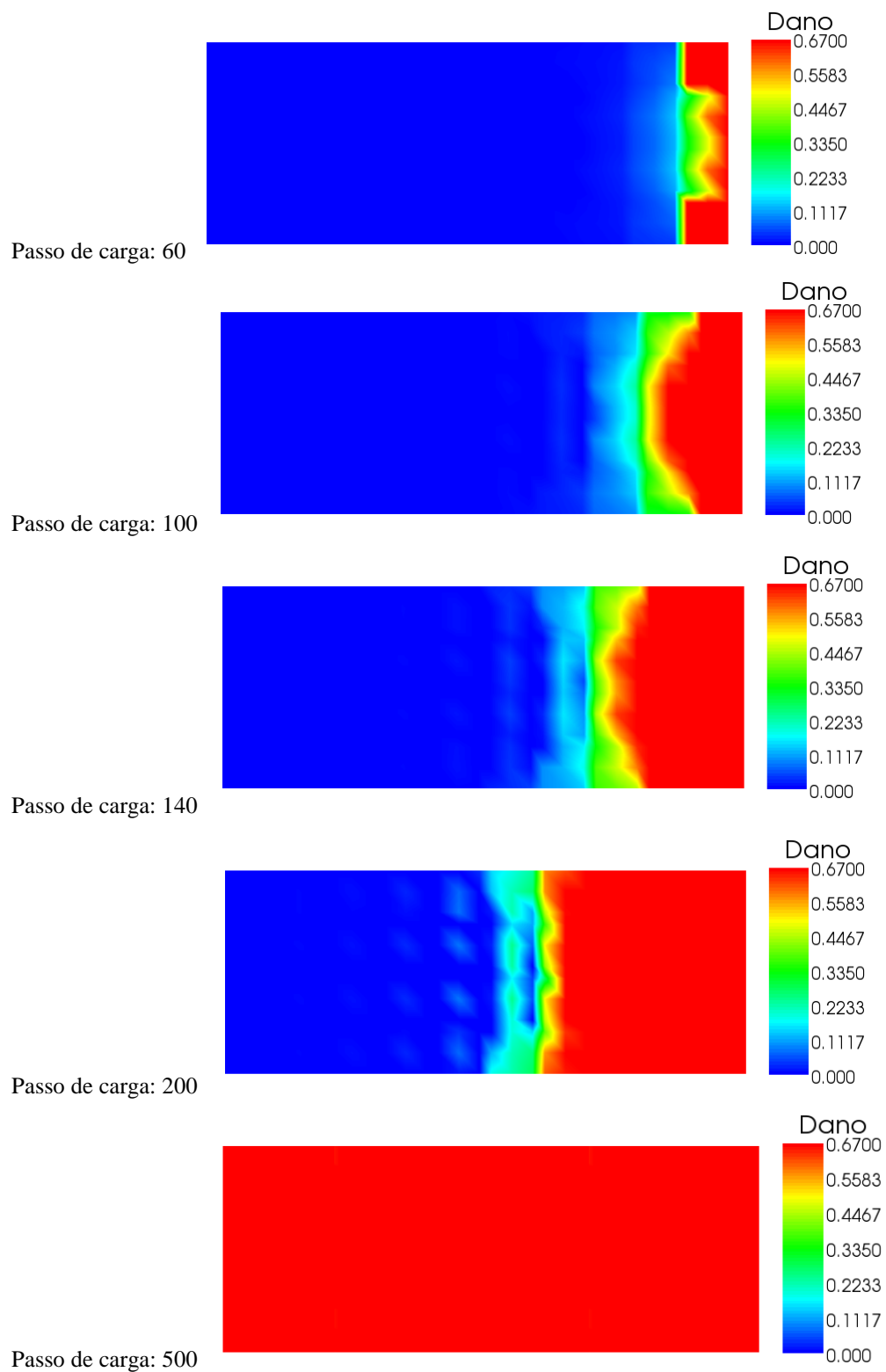


Figura 43 – Evolução da variável interna de dano para a trabécula óssea.

A evolução da variável interna de ganho de rigidez pode ser visualizada na sequência de imagens da Figura 44.

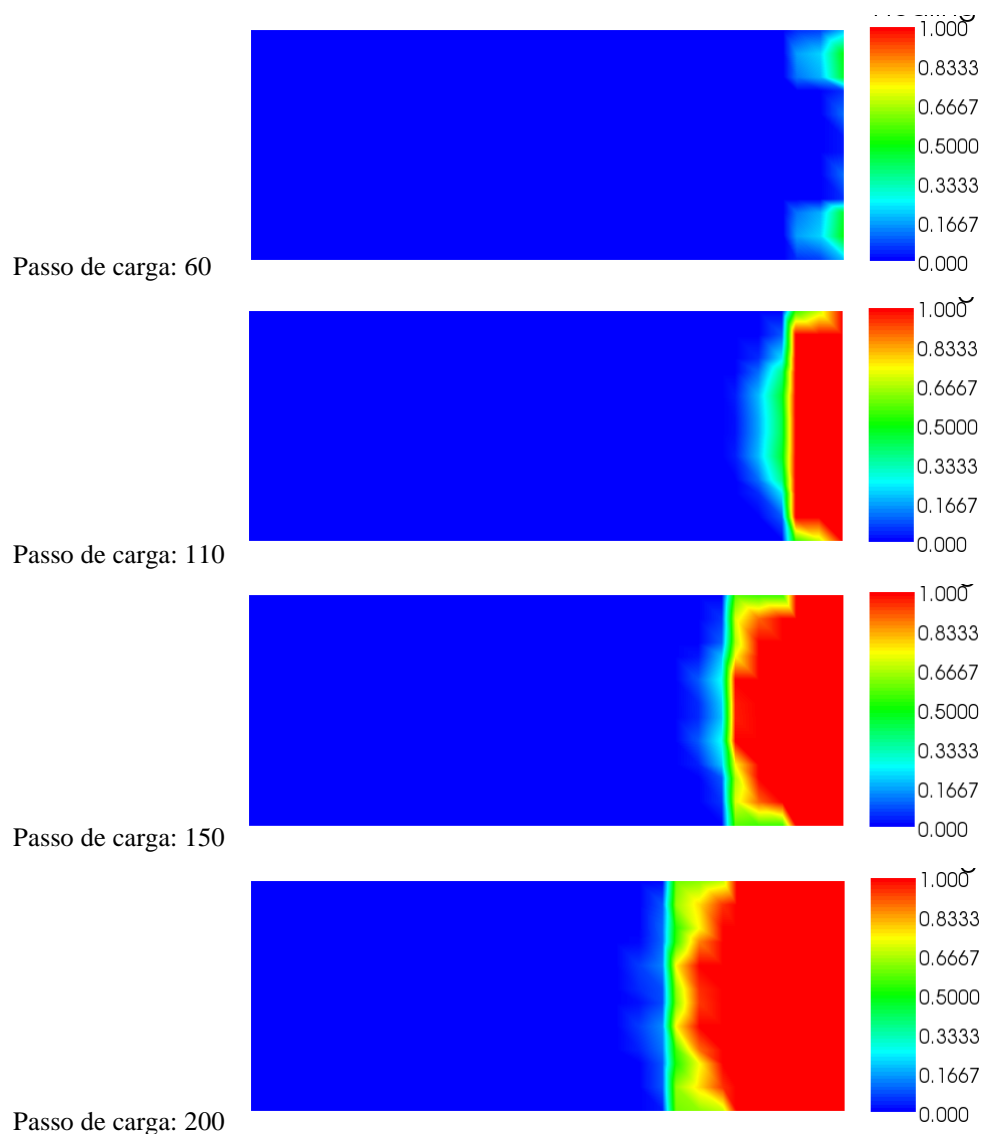
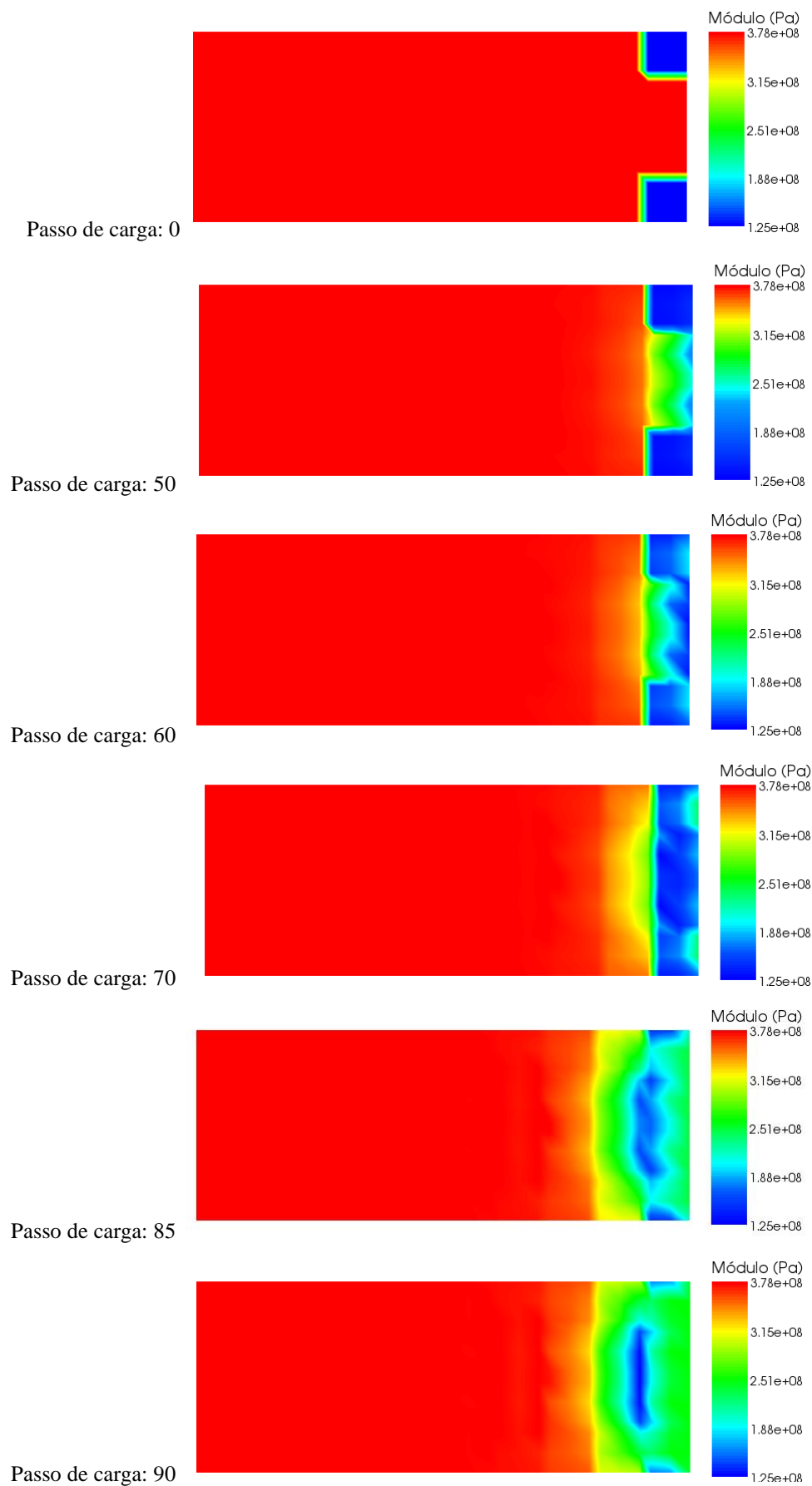


Figura 44 – Evolução da variável interna de ganho de rigidez para a trabécula óssea.

A Evolução do Módulo de Elasticidade pode ser acompanhada nesta série de imagens dos passos de carga partindo do zero até o passo de carga 500 na Figura 45. Após a simulação ter iniciado com a danificação nos dois elementos do lado direito da trabécula, esta danificação se processou em toda a camada vertical de elementos e foi se propagando para a esquerda até o final da trabécula. O processo de ganho de rigidez foi acompanhando o dano e recuperando o módulo de elasticidade que tinha baixado para aproximadamente 33 % do módulo inicial com o dano e em seguida subiu para aproximadamente 66 % do módulo inicial.



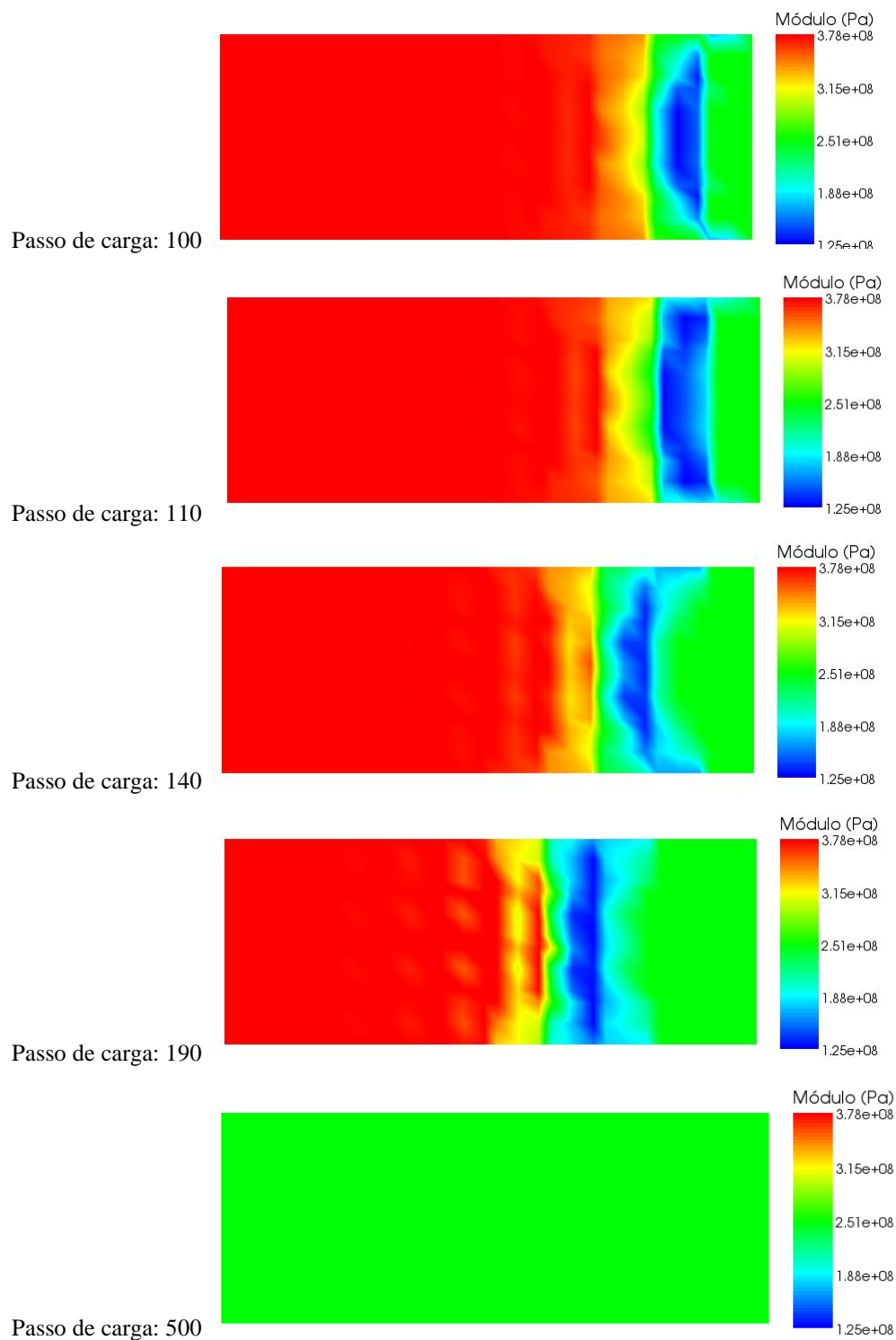


Figura 45 – Evolução da distribuição do módulo de elasticidade para o modelo da trabécula.

A densidade aparente do tecido ósseo pode ser relacionada com o módulo de elasticidade por uma equação linear, como já mostrado, e com esta relação é possível fazer uma avaliação da evolução da densidade em cada passo de carga da simulação.

7.3. Modelo Isotrópico – Aplicação na Ortodontia

A seguir são apresentados alguns resultados da simulação do exemplo da representação do movimento ortodôntico. O tempo de resolução do problema de equilíbrio para os exemplos propostos foi de aproximadamente de 5 horas. Abaixo se encontram as imagens que mostram a distribuição das tensões no dente e no osso trabecular.

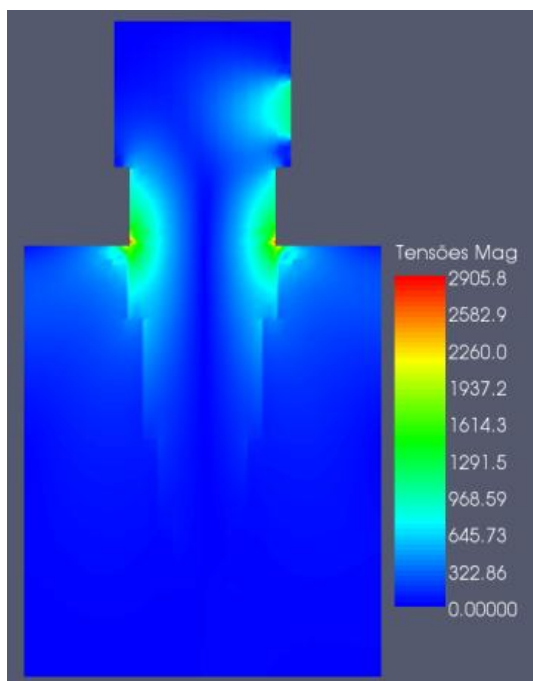


Figura 46 – Distribuição da Magnitude de Tensões (Pa) ao final do passo de carga 400.

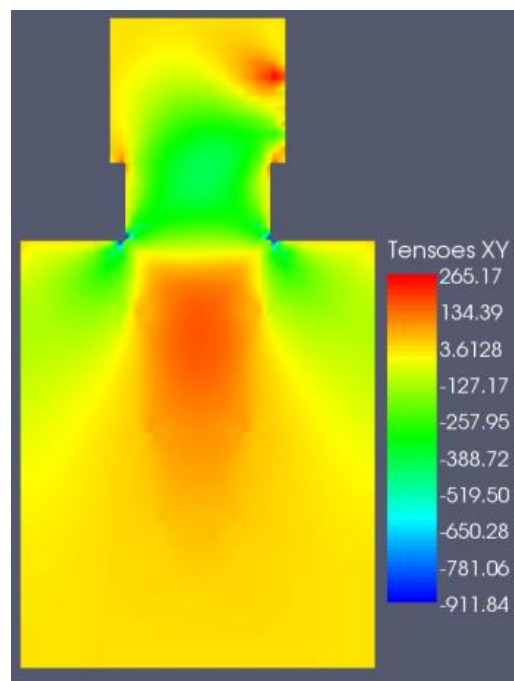


Figura 47 – Distribuição das Tensões (Pa) na direção xy ao final do passo de carga 400.

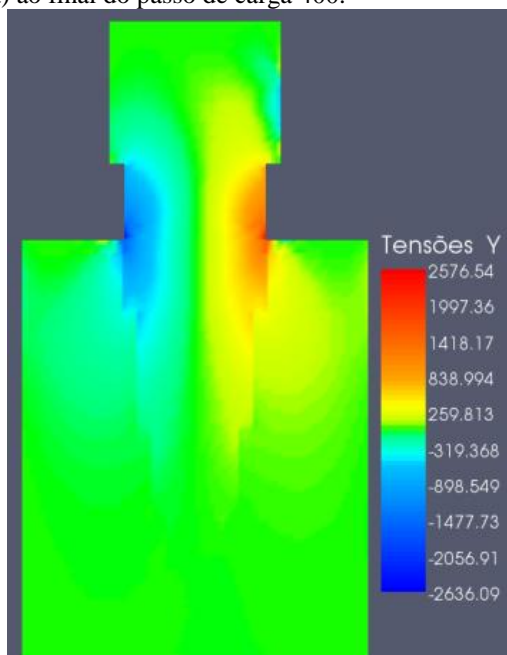


Figura 48 – Distribuição das Tensões (Pa) na direção y ao final do passo de carga 400.

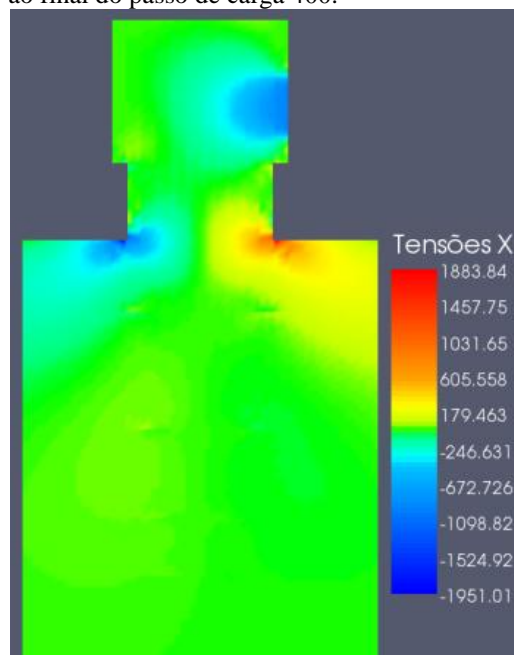


Figura 49 – Distribuição das Tensões (Pa) na direção x ao final do passo de carga 400.

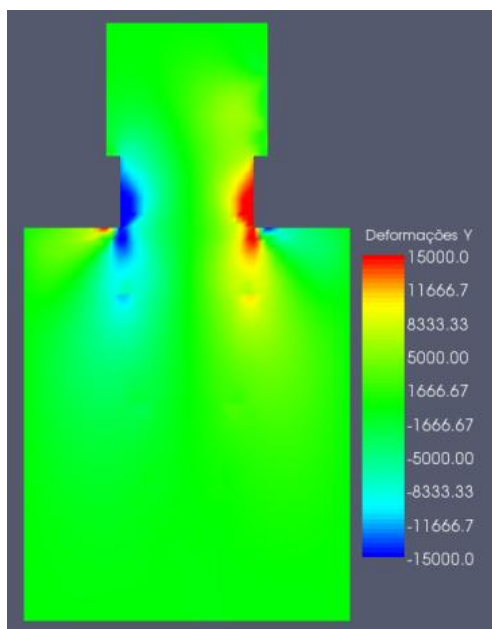


Figura 50 – Distribuição das Deformações (10^{-6} – Micro Strain) na direção y ao final do passo de carga 400.

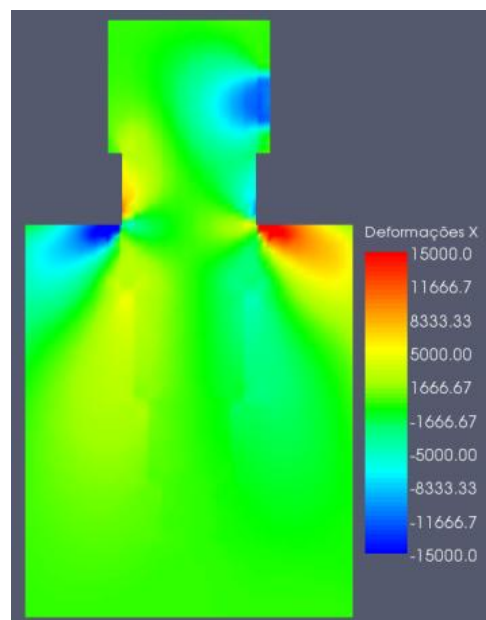


Figura 51 - Distribuição das Deformações (10^{-6} – Micro Strain) na direção x ao final do passo de carga 400.

As Figuras 54 e 55 mostram a distribuição de deformações no dente e no osso onde é possível notar que pela diferença de módulos de elasticidade as maiores deformações se encontram no contato entre o osso e o dente, no local onde foi aplicada a carga e nos cantos mais angulosos.

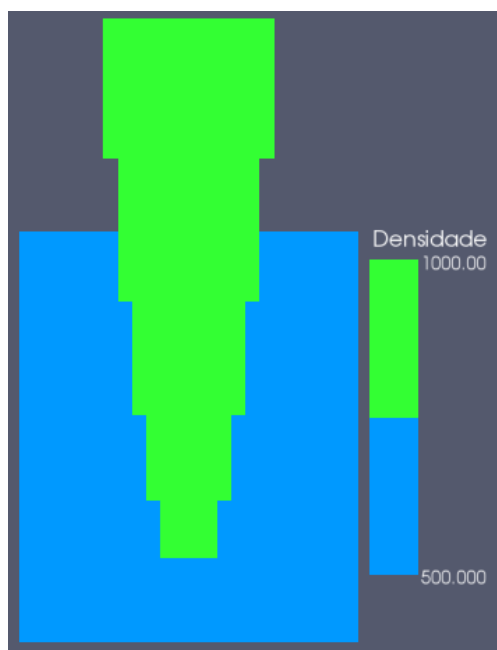


Figura 52 – Distribuição das Densidades (Kg/m^3) ao final do passo de carga 1.

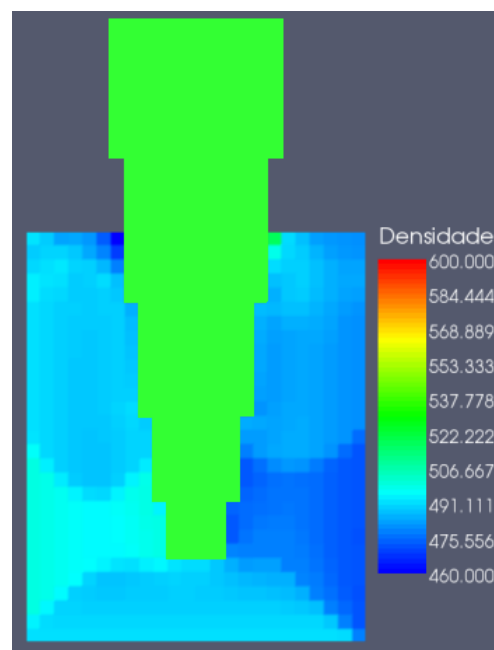


Figura 53 – Distribuição das Densidades (Kg/m^3) ao final do passo de carga 400.

As Figuras 52 e 53 mostram a evolução da distribuição das densidades no osso trabecular entre o primeiro e o último passo de carga. O dente, representado em verde claro nas figuras 52 e 53, não teve suas densidades modificadas permanecendo durante toda a análise com densidade igual a 1000 Kg/m^3 .

8. DISCUSSÃO E CONCLUSÃO

Neste capítulo será feita uma breve discussão dos resultados obtidos nas três simulações, assim como as conclusões obtidas e sugestões para trabalhos futuros. A simulação unidimensional de dois elementos finitos foi muito importante para a calibração do modelo bidimensional, pois o problema é complexo e possui muitas variáveis. Então, a simplificação primordial para o caso unidimensional foi de grande valia para entender com detalhes cada processo, subrotina e o código como um todo.

A primeira simulação apresentou resultados muito próximos aos encontrados na literatura (Kopperdahl e Keaveny, 1998) possibilitando a validação do modelo com um ensaio uniaxial de tração. Os dois exemplos gerados (rigidez inicial igual para os dois elementos e dano inicial para o segundo elemento) mostraram que iniciando um dos elementos com um dano relativamente baixo modifica-se já significativamente o comportamento da estrutura, como foi possível visualizar no diagrama de tensão – deformação e na evolução das variáveis internas e do módulo de elasticidade.

O modelo bidimensional de uma trabécula óssea, na segunda simulação, mostrou-se adequado na simulação dos processos celulares dos osteoclastos e osteoblastos no mecanismo de remodelamento ósseo. Após uma danificação, ou atividade celular osteoclástica de reabsorção óssea, o algoritmo identifica que existe uma região danificada e começa a reparar a região com o processo descrito aqui como o ganho de rigidez, ou atividade celular osteoblástica de reposição óssea. É interessante de notar que a primeira recuperação de rigidez acontece na região onde foi localizado o dano no início dos passos de carga.

Os resultados da terceira simulação mostraram-se adequados ao que era esperado para uma primeira análise, pois representou bem a relação do remodelamento no osso trabecular do ponto de vista qualitativo, tendo em vista o estudo do movimento ortodôntico. O modelo representou “tendências” de remodelamento nas mudanças das densidades que se deram ao longo dos incrementos de carga de forma iterativa, onde a densidade óssea diminuiu na região vestibular e aumentou na região lingual. Esses resultados estão de acordo com a teoria clássica que explicam a movimentação dentária induzida, segundo a qual ocorre predominantemente reabsorção óssea no lado do sentido do movimento e formação óssea no lado oposto (Reitan, 1951).

A teoria apresentada nos primeiros exemplos baseia-se entre outros fatores na definição de uma Energia Livre de Helmholtz e a partir dela e com a ajuda da análise convexa definir as variáveis internas e leis de fluxo. Entretanto, a definição apresentada nesta teoria

teve uma consequência: a recuperação da rigidez nos modelos unidimensional e bidimensional de uma trabécula óssea não foi total, ou seja, depois do dano e do ganho de rigidez o módulo de elasticidade não voltou ao módulo inicial. Isto aconteceu porque a influência da variável interna de ganho de rigidez sobre o dano não é linear conforme mostram as Equações (8.1) e (8.2).

$$\Psi = \Psi(\varepsilon, \alpha_d, \alpha_h) \quad (8.1)$$

$$\Psi(\varepsilon, \alpha_d, \alpha_h) = \frac{1}{2}(1 - \alpha_d)(1 + \alpha_h)(\varepsilon \bullet D_0 \bullet \varepsilon) \quad (8.2)$$

Esta formulação causa uma inter-relação entre a perda e o ganho de rigidez que afeta as forças termodinâmicas. A força termodinâmica de dano depende da variável interna de ganho de rigidez e a força termodinâmica de ganho de rigidez depende da variável interna de dano. A formulação também causa uma dependência não linear na rigidez da estrutura como mostra a Equação (8.3).

$$D(\alpha_d, \alpha_h) = (1 - \alpha_d)(1 + \alpha_h)D_0 \quad (8.3)$$

Uma sugestão futura para o trabalho é a adoção de uma Energia Livre de Helmholtz separável como mostram as Equações (8.4) e (8.5).

$$\Psi = \Psi^d(\varepsilon, \alpha_d) + \Psi^h(\varepsilon, \alpha_h) \quad (8.4)$$

$$\Psi = \frac{1}{4}(1 - \alpha_d)(\varepsilon \bullet D_0 \bullet \varepsilon) + \frac{1}{4}(1 + \alpha_h)(\varepsilon \bullet D_0 \bullet \varepsilon) \quad (8.5)$$

Com esta mudança uma variação na variável interna de dano de um valor x vai influenciar na rigidez da mesma forma que uma variação x na variável de ganho de rigidez como mostra a Equação (8.6).

$$D(\alpha_d, \alpha_h) = \frac{1}{2}(1 - \alpha_d)D_0 + \frac{1}{2}(1 + \alpha_h)D_0 \quad (8.6)$$

Analisando agora a terceira simulação: variáveis termodinamicamente consistentes permitiram avaliar as regiões de dano e de ganho como consequência das deformações causadas pela força ortodôntica aplicada. Utilizando como base da formulação a teoria termodinâmica e a análise convexa futuramente será possível incluir neste modelo algumas variáveis que representem hormônios, fatores bioquímicos e células ósseas, aproximando ainda mais o modelo da realidade que envolve muitos conceitos e processos biológicos.

Na construção da teoria e das leis que governam o fenômeno da terceira simulação foram propostas duas leis, uma para tração e outra para a compressão, sendo que nas duas foi possível obter ganho e/ou perda óssea. Em cada uma destas leis existiam taxas de remodelamento, funções e mecanismos diferentes. Esse resultado está de acordo a recente

teoria para movimentação ortodôntica proposta por Melsen 2001, onde é possível haver formação óssea tanto na área de tração quanto de compressão, dependendo do nível de tensão e deformação dentro do tecido ósseo.

Para que os modelos numéricos representem melhor o movimento ortodôntico, e o processo de remodelamento em si, são necessários mais experimentos de onde se possam extrair leis e curvas comportamentais dos materiais estudados (ossos corticais e trabeculares, ligamento, e dentina) e também de mais relações interdisciplinares ligando pesquisadores das áreas exatas e tecnológicas a pesquisadores da área da saúde para unir as duas áreas de conhecimento.

Este trabalho ainda encontra-se em fase preliminar e entre as previsões para sua continuidade estão a inclusão no modelo do ligamento periodontal e do osso cortical. O programa de elementos finitos a cada passo de carga poderá avaliar a necessidade de adaptabilidade da malha no caso de uma fratura óssea. Outra sugestão para a continuidade do trabalho é a paralelização de algumas rotinas para otimização do tempo de processamento.

9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AKAI, T. J. **Applied Numerical Methods for Engineers**. USA: John Wiley & Sons, Inc. 1994.
- ASCENZI, A. Biomechanics and Galileo Galilei. **Journal of Biomechanics**. 26, 95–100, 1993.
- AVANCINI, E.; FAVARETTO, J. A. **Biologia – Uma abordagem evolutiva e ecológica**. Vol. 2. São Paulo, Ed. Moderna, 1997.
- BODOVILLÉ, G. Sur l'endommagement et le matériaux standard implicates. **C. R. Acad. Sci. Paris**. v. 327, p. 715 – 720, 1999.
- BODOVILLÉ, G. On Generalised and Implicit Normality Hypotheses. **Meccanica**. v. 36, p. 273 – 290, 2001.
- BODOVILLÉ, G.; de SAXCÉ, G. Plasticity with non-linear kinematic hardening: modelling and shakedown analysis by the bipotential approach, **Eur. J. Mech. A/Solids**, 2001, 20: 99–112.
- BULIGA, M.; DE SACXÉ, G.; BALLÉ. C. Existence and Construction of bipotentials for graphs of multivalued laws, 2007.
- BUCKWALTER J.A.; GLIMCHER M.J.; COOPER R.R.; RECKER R. Bone Biology, Part I and Part II. **The Journal of Bone and Joint Surgery**, Vol. 77-A, No. 8. 1995.
- BURGER, E. H.; KLEIN-NULEND, J. Mechanotransduction in bone – role of the lacuno-canalicular network. **FASEB Journal** 13 (Suppl.), S101-S112, 1999.
- CATTANEO, P.M.; DALSTRA, M. & MELSEN B. The finite element method: A tool to study orthodontic tooth movement. **J Dental Res**; 84: 428-433, 2005.
- DOBLARÉ M.; GARCIA J.M. Anisotropic bone remodelling model based on a continuum damage-repair theory. **Journal of Biomechanics**, Vol. 35, pp 1-17, 2002.
- DOBLARÉ M.; GARCIA J.M.; GOMEZ; M.J. Modelling bone tissue fracture and healing: a review". **Eng. Fract.Mech.** 71, 1809-1840, 2004.
- DOBLARÉ, M.; GARCIA, J. M.; CEGOÑINO, J. Development of an internal bone remodelling theory and applications to some problems in orthopaedic biomechanics, **Meccanica**, 37, pp. 365-374, 2002.
- DOBNIG H.; TURNER R.T. Evidence that intermittent treatment with parathyroid hormone increases bone formation in adult rats by activation of bone lining cells. **Endocrinology** 136:3632–3638, 1995.
- EPKER, B.N.; FROST, H.M. Correlation of bone resorption and formation with the physical behavior of loaded bone. **Journal of Dental Research**, 44, 33 -41, 1965.

- FEIJÓ, R. A.; TAROCO, E. Principios Variacionales y El Método de los Elementos Finitos em la Teoria de Placas y Cascaras. **Curso de Mecânica Teórica e Aplicada – Teoria das cascas e suas aplicações na engenharia**, Rio de Janeiro: LCC/CNPq Laboratório de Computação Científica, 1983.
- FREITAS, L. A. R. U. **Modelagem Constitutiva de Solos Utilizando Potenciais Termodinâmicos Generalizados**. Dissertação de Mestrado, UFPR, 2008.
- FROST H. In Vivo Osteocyte Death, **Journal of Bone and Joint Surgery**, 42:138-143, 1960.
- FROST, H.M. Presence of microscopic cracks in vivo in bone, **Bulletin of Henry ford Hospital**. 8, 25–35, 1960.
- HAN, W.; REDDY, B.D. **Plasticity - Mathematical Theory and Numerical Analysis**. USA: Springer-Verlag New York, Inc., 1999.
- HAZELWOOD S.J.; MARTIN R.B.; RASHID M.M.; RODRIGO J.J. A mechanistic model for internal bone remodeling exhibits different dynamic responses in disuse and overload. **Journal of Biomechanics**, Vol. 34, pp 299-308, 2001.
- HECKE, M.B. **Potenciais Generalizados e Otimização na Análise Elasto-Plástica**. Tese de Doutorado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 1991.
- HECKE, M. B. **O Método dos Elementos Finitos Aplicado a Problemas Planos**. Material didático da disciplina “O método dos elementos finitos aplicado à engenharia de estruturas” da Universidade Federal do Paraná, 1984.
- HECKE M. B., TORMENA F. V., FARANI L. A., CARVALHO L. M. R., ZOUAIN, N. e SIMÕES, J. A. **A scalar damage-remodelling bone models derived from thermodynamics pseudo-potentials**, 2008.
- HERNANDEZ C.J.; HAZELWOOD S.J.; MARTIN R.B. The Relationship Between Basic Multicellular Unit Activation and Origination in Cancellous Bone. **Bone**, Vol. 25, No. 5, pp 585-7, 1999.
- HERNANDEZ C.J.; BEAUPR_E G.S.; CARTER D.R. A model of mechanobiologic and metabolic inuences on bone adaption. **Journal of Rehabilitation Research and Development**, Vol. 37, No. 2, 2001.
- HERNANDEZ C.J. **Simulation of bone remodeling during the development and treatment of osteoporosis**. PhD Thesis, Stanford University, 2001.
- HJIAJ, M. F., FORTIN, M., DE SAXCE, G. A Complete Stress Update Algorithm For the non-Associated Drucker-Prager Model Including Treatment of the Apex, **International Journal of Engineering Science**, 41:1109-1143, 2003.
- HONG and BARLETT . **The Routledge Handbook of Biomechanics and Human Movement Science**, Routledge, 2008.

- HOULSBY, G.T.; PUZRIN, A.M. A thermomechanical framework for constitutive models for rate-independent dissipative materials. **International Journal of Plasticity**. v. 16, p. 1017 – 1047, 2001.
- GUIDORIZZI, H. L. **Um Curso de Cálculo - Volume 1**. LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2001.
- JACOBS C.R. **Numerical simulation of bone adaption to mechanical loading**. PhD Thesis, Stanford University, 1994.
- JEPSEN K.J., DWIGHT T.D., OZAN A.; Observation of Damage in Bone. Chapter 17 in: **Bone Mechanics Handbook**; 2nd edition. Cowin SC (editor), CRC Press, pp 17-1-17-8, 2001.
- KOPPERDAHL, D.L.; KEAVENY, T.M., Yield strain behavior of trabecular bone, **Journal of Biomechanics** 31, 1998.
- KROLL, Martin H. Parathyroid Hormone Temporal Effects on Bone Formation and Resorption. **Bulletin of Mathematical Biology** 62, 163–187, 2000.
- LEMAIRE, V. et al. Modeling the interactions between osteoblast and osteoclast activities in bone remodelling. **Journal of Theoretical Biology** 229, 293, 309, 2004.
- LEMAITRE, J.; CHABOCHE, J.-L. **Mechanics of Solid Materials**. Cambridge University Press, 1990.
- MARTIN, R.B. Fatigue Damage, Remodeling, and the Minimization of Skeletal Weight. **Journal of theoretical Biology**, Vol. 220, pp 271-6, 2003.
- MARTIN R.B.; BURR D.R.; SHARKEY N.A.; **Skeletal Tissue Mechanics**. Springer, New York, 1998.
- MCNAMARA, L.M.; PRENDERGAST P.J. Bone remodelling algorithms incorporating both strain and microdamage stimuli, **Journal of Biomechanics** 40, 1381-1391, 2007.
- MEIRELES, J. K. S.; URSI, W. Centrex: uma proposta de sistema de forças ortodônticas para atuação no centro de resistência. **Revista Dental Press de Ortodontia Ortopédica Facial** 38, Maringá, vol. 12, n. 6, pp. 38-47, 2007.
- MEIKLE, C. M. The tissue, cellular, and molecular regulation of orthodontic tooth movement: 100 years after Carl Sandstedt. **The European Journal of Orthodontics**, pp. 221-240, 2006.
- MELSEN B. Tissue reaction to orthodontic tooth movement – a new paradigm. **European Journal of Orthodontics**. 23:671-681, 2001.
- NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. **Numerical Optimization**. New York: Springer-Verlag, 1999.
- ODEN, J. T.; CAREY, G. F.; BECKER, E. B. **Finite Elements – An Introduction**. EUA: Prentice-Hall International, v.1., 1981.

- PRENDERGAST P. J.; TAYLOR D.; Prediction of bone adaptation using damage accumulation. **Journal of biomechanics**, vol. 27, no8, pp. 1067-1076 (1 p. 1/4), 1994.
- PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. **Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing**. 2^a edição. Cambridge University Press, 1992.
- PROFFIT, W. R; FIELDS, H. **Contemporary orthodontics**. 3. ed. St. Louis: Mosby Co. 742p, 2000.
- RAMTANI S.; GARCIA J.M.; DOBLARÉ M. Computer simulation of an adaptive damage-bone remodeling law applied to three unit bone bars structure. **Comput Biol Med** 34:259–273 , 2004.
- REITAN, K. The tissue reaction as related to the functional factor. **European Journal of Orthodontics** 29, i58–i64 (Transactions of the European Orthodontic Society 1951, pp. 123–136), 2007.
- ROCKAFELLAR, R. T. **Convex Analysis**. Princenton University Press, 1970.
- ROBLING, A. D.; STOUT, S. D. **Morphology or the Drifting Osteon, Cells Tissues Organs** 164:192-204, 1999.
- ROSENBERG, A. **Skeletal system and soft tissue tumors, in Robbins Pathologic Basis of Disease**, 5th edn, R. S. Cotran, V. Kumar and S. L. Robbins (Eds), Philadelphia: W. B. Saunders Co., pp. 1219–1222, 1994.
- RÜBERG, T. **Computer simulation of adaptive bone remodeling**. Technische Universität Braunschweig, Centro Politécnico Superior Zaragoza, 2003.
- SIMÕES, J. A. **Curso de Biomecânica**. Grupo de Investigação em Biomecânica. Departamento de Engenharia Mecânica. Universidade de Aveiro, Portugal, 2008.
- TIMOSHENKO, S. P. **Resistência dos Materiais**. 3. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1979.
- TOHMÉ, J. F.,; F. CORMAN; R. LINDSAY. **Osteoporosis, in Principles and Practice of Endocrinology and Metabolism**, 2nd edn, K. L. Becker (Ed.), Philadelphia: J. B. Lippincott Co. pp. 567–585, 1995.
- TORMENA, F. V. **Um Modelo de Remodelamento Ósseo Utilizando Potenciais Termodinâmicos Generalizados**. Tese de Doutorado do Programa de Pós Graduação em Métodos Numéricos aplicados em Engenharia da Universidade Federal do Paraná, 2009.
- TURNER CH, PAVALKO FM. Mechanotransduction and functional response of the skeleton to physical stress: the mechanisms and mechanics of bone adaptation. **J Orthop Sci** 3:346-355, 1998.

- VERNA C.; DALSTRA M.; LEE T.C.; CATTANEO P.M.; MELSEN B. Microcracks in the alveolar bone following orthodontic tooth movement. a morphological and morphometric study. **Eur J Orthod.** 26:459-67, 2004.
- VERNA, C., MELSEN B. Tissue reaction to orthodontic tooth movement turnover conditions. **Ortho Cranofacial Res** 6; 155-163, 2003.
- WOLFF, J.L. The Law of Bone Remodelling. **Springer**, Berlin, 1986.

APÊNDICE A. ANÁLISE CONVEXA

Um breve resumo dos conceitos básicos da análise convexa encontra-se a seguir. Os conceitos apresentados baseiam-se, predominantemente, nos trabalhos de Rockafellar (1970), Lemaréchal (1993) e Houtsky (2002). O objetivo dessa seção não é apresentar os conceitos com formalismo e rigor matemático, mas sim introduzir definições e conceitos da análise convexa que se mostram úteis na formulação dos modelos desta dissertação.

Ao longo dessa seção, C representa um subconjunto em um espaço vetorial V , com dimensões R e R^n . A notação $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é utilizada para indicar um produto interno.

A.1 Funções Convexas de uma Variável Real

Funções convexas de uma variável real formam uma importante classe de funções no contexto do que é usualmente chamado de análise real. Estas funções são muito utilizadas para otimização em muitas áreas da matemática aplicada onde suas propriedades são muito úteis para definir limites, contornos de inequações.

Os intervalos formam os exemplos mais simples de subconjuntos dos Reais. Podem-se definir intervalos da seguinte maneira: um subconjunto $I \subset R$ é um intervalo se, sempre que x e x' pertencerem a I , uma das seguintes propriedades for atendida:

- (i) Todo ponto entre x e x' pertencer a I .
(definição baseada no ordenamento natural dos reais).
- (ii) Para todo α entre 0 e 1 o ponto $\alpha x + (1 - \alpha)x'$ pertencer a I .
(definição usando a estrutura vetorial dos reais).

A.2 Classificação de Intervalos

A seguinte classificação de intervalos não vazios é conveniente:

- Intervalos compactos:

$$I = [a, b] \quad (a, b \in R \text{ com } a \leq b) \quad (\text{A.1})$$

- Intervalos limitados, porém não fechados:

$$[a, b[,]a, b],]a, b[\quad (a, b \in R, a < b) \quad (\text{A.2})$$

- Intervalos com limite superior e sem limite inferior:

$$]-\infty, b] \text{ e }]-\infty, b[\quad (b \in R) \quad (\text{A.3})$$

- Intervalos com limite inferior e sem limite superior:

$$[a, +\infty[\text{ e }]a, +\infty[\quad (a \in \mathbb{R}) \quad (\text{A.4})$$

- O único intervalo sem limites inferior e superior chamado intervalos dos reais.

A.3 Gráfico e Epigráfico

Utilizando a definição básica de função $f: D \rightarrow \mathbb{R}$ define-se:

O gráfico de f é o subconjunto de $D \times \mathbb{R}$.

$$gr f = \{(x, r) : x \in D \text{ e } r = f(x)\} \quad (\text{A.5})$$

O Epigráfico de f é o conjunto de pontos que estão no ou acima do gráfico.

$$epi f = \{(x, r) : x \in D \text{ e } r \geq f(x)\} \quad (\text{A.6})$$

O Epigráfico estrito é definido substituindo na Equação (A.6) \geq por $>$.

Definição 1. Sendo I um intervalo não vazio dos reais, $f: I \rightarrow \mathbb{R}$ é dita convexa em I quando, para todos os pares de pontos (x, x') no Intervalo I e todos os $\alpha \in]0,1[$:

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)x') \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(x') \quad (\text{A.7})$$

Se trocarmos na desigualdade (A.7) o \geq por $>$ tem-se a definição de uma função estritamente convexa.

Uma função convexa também pode ser definida considerando I , o intervalo dos reais, $f: I \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa no intervalo I se, e somente se, $epi f$ é um subconjunto convexo do \mathbb{R}^2 . Equivalente a dizer que uma função é convexa quando a epígrafe estrita é convexa.

O sentido geométrico da convexidade pode ser mostrado considerando o segmento $P_x P_{x'}$ juntando o ponto $P_x = (x, f(x))$ ao ponto $P_{x'} = (x', f(x'))$ da Figura A1. Geometricamente, f é convexa se, para todo x, x' no intervalo I e para todo u em $]x, x'[,$ o ponto $P_u = (u, f(u))$ ou o $gr f$ encontrar-se abaixo do segmento $P_x P_{x'}$ (assumindo $x < x'$).

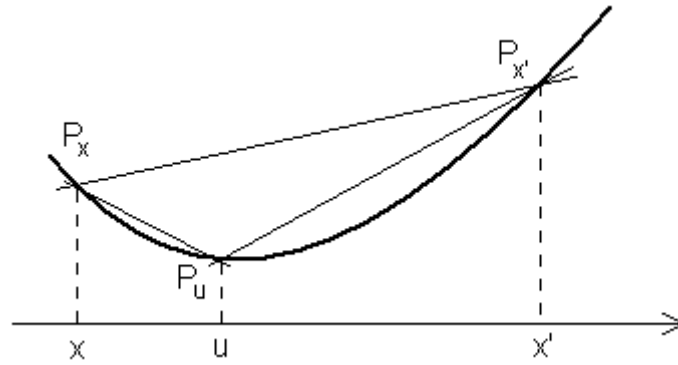


Figura A1 – Propriedade fundamental de um Epigráfico convexo.

A Figura A1 mostra que a derivada da função em x é menor que a derivada da função em u que é menor que a derivada da função em x' .

A.4 Funções Convexas no R^n

Seja f uma função cujos valores são reais ou $\pm\infty$ e cujo domínio é um subconjunto S de R^n . O conjunto definido pela Equação (A.8) é denominado de epigráfico de f e representado por $epi f$. A Figura A2 ilustra o epigráfico de uma função $f(x)$ de uma única variável.

$$\{(x, \mu) / x \in S, \mu \in S, \mu \geq f(x)\} \quad (A.8)$$

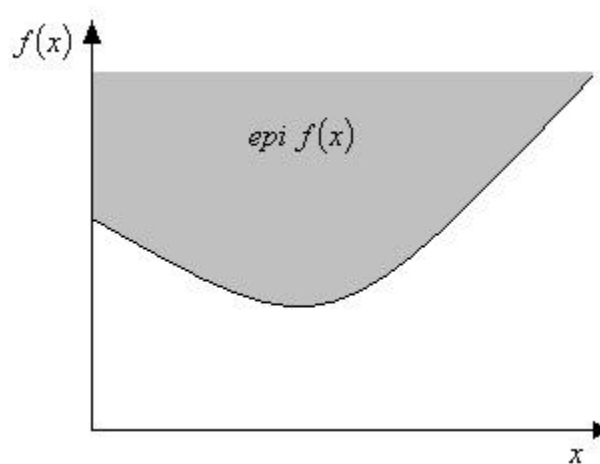


Figura A2 - $Epi f(x)$, sendo $f(x)$ função de uma única variável.

Diz-se que a função f é convexa se $epi f$ é um subconjunto convexo de R^{n+1} . Isto é, f é convexa se o segmento de reta que passa por um par de pontos pertencentes à $epi f$ também estiver contido em $epi f$.

A.5 Funções Convexas Conjugadas

A definição de funções conjugadas surge, naturalmente, do fato que o epigráfico de uma função convexa própria (*epi f*) em R^n é a interseção dos semi-espacos fechados que o contêm. Por definição o epigráfico de uma função convexa própria é um conjunto convexo fechado, de forma que o *Teorema 1*, apresentado a seguir, pode ser aplicado.

Teorema 1. Um conjunto convexo fechado C é a interseção dos semi-espacos fechados que o contêm.

Sejam $\emptyset \neq C \neq R^n$, $a \notin C$, $C_1 = \{a\}$ e $C_2 = C$. Existe um hiperplano separando C_1 e C_2 tal que um dos semi-espacos associado a esse hiperplano contém C , mas não contém a . O mesmo ocorre para os semi-espacos associados a outros hiperplanos que dividem o espaco em semi-espacos. Portanto, a interseção dos semi-espacos fechados que contém C , não contém outros pontos além daqueles pertencentes a C . A Figura A3 ilustra o conceito.

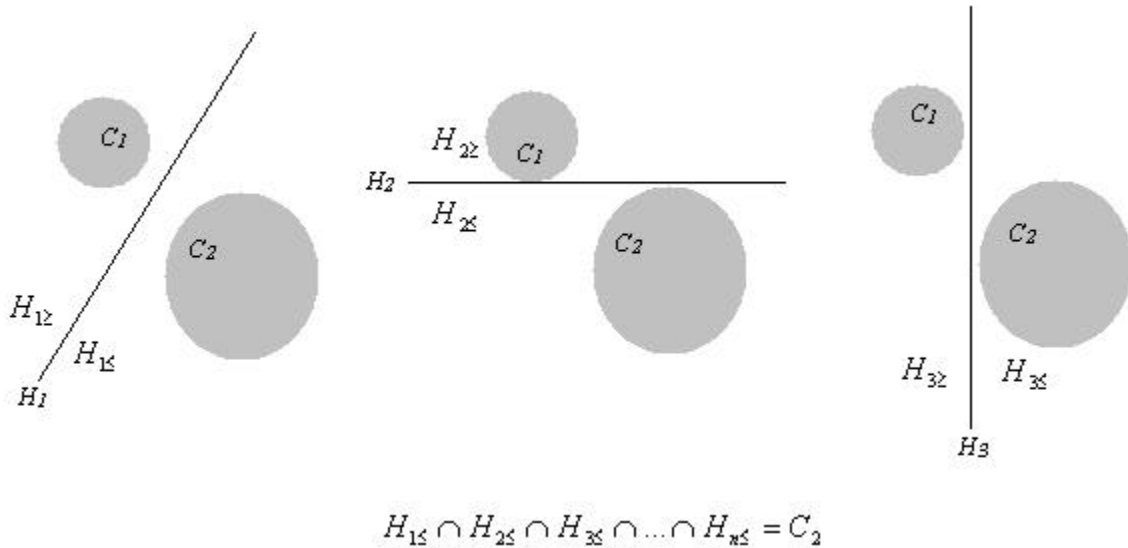


Figura A3 - Semi-Espacos fechados que contêm C_2 .

Hiperplanos em R^{n+1} podem ser representados por funções lineares da forma apresentada na Equação (A.9).

$$h(x) = \langle x, x^* \rangle - \mu^*, \quad x^* \in R^n, \quad \mu^* \in R \quad (\text{A.9})$$

Em R^2 , as funções $h(x)$ apresentadas na Equação (A.9) são retas que dividem o espaço bidimensional em semi-espacos. Dessa forma, o epigráfico de $h(x)$ ($epi h$) é um semi-espaço, conforme apresentado na Figura A4.

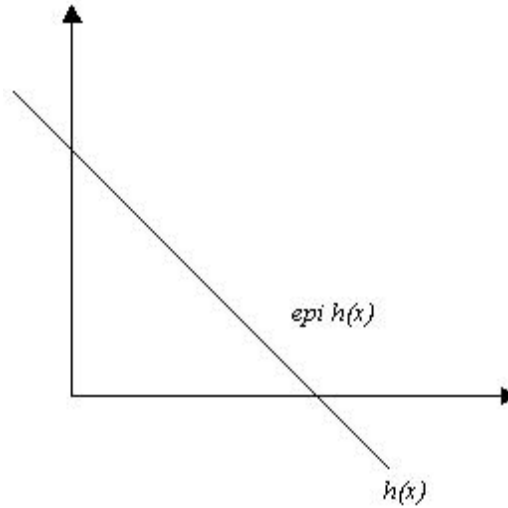


Figura A4 - $Epi h(x)$ em R^2 .

Sejam funções $h(x)$ da forma apresentada na Equação (A.9) e seja $f(x)$ uma função convexa, tal que $h(x) \leq f(x)$. Os epigráficos das funções $h(x)$, apresentados na Equação (A.10), são semi-espacos fechados que contém o epigráfico de $f(x)$, conforme ilustrado na Figura A5.

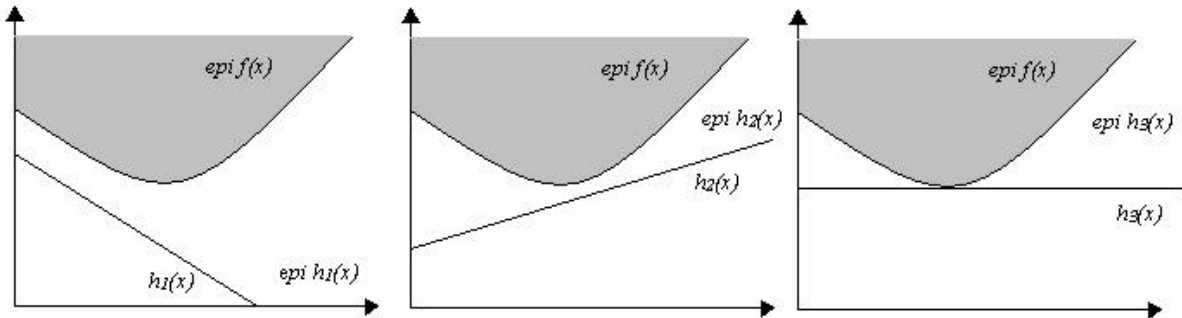


Figura A5 - Semi-Espacos fechados que contém $epi f(x)$.

$$epi h = \{(x, \beta) / \beta \geq \langle x, x^* \rangle - \mu^*\} \quad (A.10)$$

Pelo Teorema 1, o epigráfico de $f(x)$ é a interseção dos semi-espacos fechados que o contém, isto é, dos epigráficos de $h(x)$, conforme ilustrado na Figura A6. Observa-se, nessa figura, que em cada ponto x existe um hiperplano tangente à função $f(x)$. Dessa forma, $f(x)$ assume, em cada ponto x , o valor da função $h(x)$ associada ao hiperplano tangente a $f(x)$ no

ponto. Como $h(x) \leq f(x)$, a função $f(x)$ assume o maior valor entre aqueles assumidos pelas funções $h(x)$ no ponto. O Teorema 2 enuncia o exposto.

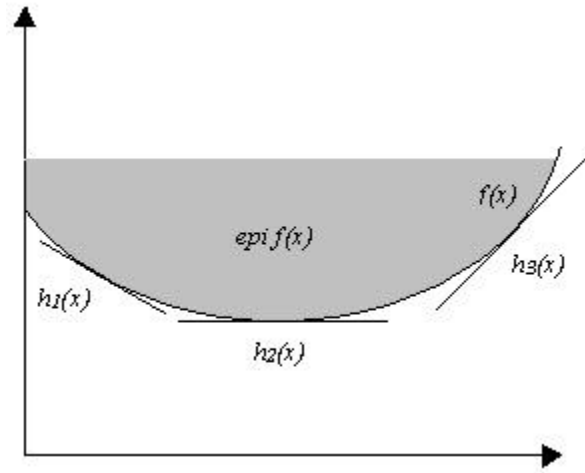


Figura A6 - $\text{epi } f(x)$ E hiperplanos tangentes a $f(x)$.

Teorema 2. Uma função convexa fechada $f(x)$ é, ponto a ponto, o máximo da coleção de todas as funções $h(x)$, tais que $h(x) \leq f(x)$.

Matematicamente, o Teorema 2 pode ser descrito através da Equação (A.11).

$$f(x) = \sup\{h_i(x)/i \in I\} = \sup\{\langle x, x^* \rangle - \mu^*\} \quad (\text{A.11})$$

Finalmente, o epigráfico de $f(x)$ é dado pela Equação (A.12).

$$\text{epi } f = \{(x, \beta)/\beta \geq \sup\{h_i(x)\}\} \quad (\text{A.12})$$

A partir das Equações (A.10), (A.11) e (A.12) pode-se chegar à definição de função conjugada. Segundo a Equação (A.10), para que os pontos (x, b) pertençam a $\text{epi } h$, é necessário que $\langle x, x^* \rangle - \mu^* - \beta \leq 0$. No entanto, considerando que $\text{epi } f \subset \text{epi } h$ e tendo em vista que $\beta \geq f(x)$ em $\text{epi } f$, então $\langle x, x^* \rangle - \mu^* - f(x) \leq 0$ também se aplica. Como essa desigualdade deve ser satisfeita para todo e qualquer $x \in C$, então $\sup_{x \in C} \{\langle x, x^* \rangle - \mu^* - f(x)\} \leq 0$. Essa condição pode ser reescrita conforme apresentado na Equação (A.13).

$$\mu^* \geq \sup_{x \in C} \langle x, x^* \rangle - f(x)/x \in R^n \quad (\text{A.13})$$

A Equação (A.13) representa o epigráfico de uma função f^* definida conforme apresentado na Equação (A.14). A função f^* é a função conjugada de f , também denominada de Transformada de Legendre-Fenchel da função f . Ponto a ponto, a função f^* corresponde ao máximo de todas as funções $g(x^*) = \langle x, x^* \rangle - \mu$, tais que os pontos (x, μ) pertencem ao epigráfico de f .

$$f^*(x^*) = \sup_x \{\langle x, x^* \rangle - f(x)\} \quad (\text{A.14})$$

Da mesma forma, a função $f(x)$ pode ser obtida a partir da Equação (A.15).

$$f(x) = \sup_{x^*} \{\langle x, x^* \rangle - f^*(x^*)\} \quad (\text{A.15})$$

A.6 Funções positivas-homogêneas, funções próprias e funções fracas semi-contínuas (l.s.c.)

Uma função f é dita positiva-homogênea se:

$$f(\alpha x) = \alpha f(x) \quad \forall x \in X, \forall \alpha > 0 \quad (\text{A.16})$$

Uma função f é dita própria se:

$$f(x) < +\infty \text{ para pelo menos um } x \in X \text{ e } f(x) > -\infty \quad \forall x \in X \quad (\text{A.17})$$

Finalmente, uma função f é dita fraca semi-contínua (l.s.c) se

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \inf f(x_n) \geq f(x) \quad (\text{A.18})$$

para qualquer sequência $\{x_n\}$ convergindo para x .

A.7 Subgradiente e subdiferencial

Um vetor x^* é o subgradiente de uma função convexa f em um ponto x se a desigualdade apresentada na Equação (A.19) for satisfeita.

$$f(z) \geq f(x) + \langle x^*, z - x \rangle, \quad \forall z \quad (\text{A.19})$$

Essa desigualdade possui um significado geométrico simples quando f é finita em x . Significa que o gráfico de uma função $h(z) = f(x) + \langle x^*, z - x \rangle$ é um hiperplano suporte não vertical de $\text{epi } f$ no ponto $(x, f(x))$. Uma vez que $h(z)$ é um hiperplano suporte de $\text{epi } f$ em $(x, f(x))$, a função $h(z)$ possui o mesmo valor que a função $f(z)$ nesse ponto. No entanto, para todos os outros pontos $h(z) < f(z)$. A Figura A7 ilustra esse conceito.

O conjunto de todos os subgradientes de f em x é chamado de subdiferencial de f em x e é representado pelo símbolo $\partial f(x)$. A Figura A8 ilustra o conceito de subdiferencial.

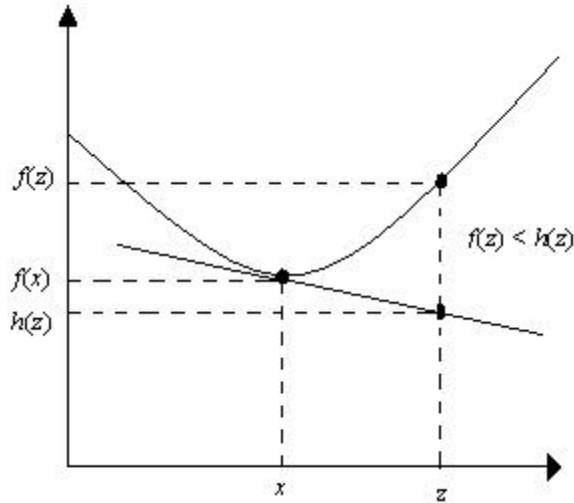


Figura A7 - Significado geométrico da desigualdade do subgradiente.

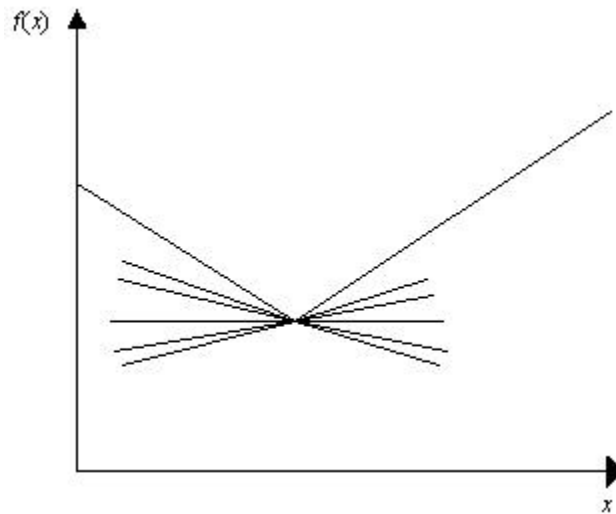


Figura A8. Subdiferencial.

A.8 Funções definidas para subconjuntos convexos

Existe uma série de correspondências úteis entre subconjuntos convexos e funções convexas. A mais simples associa a cada subconjunto C em R^n uma função Indicatriz definida conforme apresentado na Equação (A.20).

$$I_C(x) = \begin{cases} 0, & x \in C \\ +\infty, & x \notin C \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

Outra função importante é a função *gauge* definida conforme apresentado na Equação (A.21). Nessa equação $\inf\{x\}$ representa o menor valor de um subconjunto.

$$\gamma_C(x) = \inf\{\mu \geq 0 / x \in \mu C\} \quad (\text{A.21})$$

Em outras palavras, a função gauge representa o menor fator positivo pelo qual um subconjunto pode ser multiplicado de forma que x continue a pertencer ao subconjunto após a multiplicação. O sentido dessa função pode ser melhor compreendido para subconjuntos contendo a origem. Nesses casos, a função gauge assume valor 1 para qualquer ponto pertencente a fronteira do subconjunto, assume valores menores do que a unidade para pontos internos do subconjunto e maior do que a unidade para valores que estão fora do subconjunto.

Outra função amplamente utilizada na análise convexa é a função suporte de um conjunto convexo C . A Equação (A.22) define matematicamente a função suporte.

$$\delta^*(x^*/C) = \sup\{\langle x, x^* \rangle / x \in C\} \quad (\text{A.22})$$

Por definição, a função suporte de um conjunto convexo C descreve todos os semi-espacos fechados que o contêm. De fato, tem-se que $C \subset \{x / \langle x, x^* \rangle \leq \beta\}$ se e somente se $\beta \geq \delta^*(x^*/C)$.

Finalmente, o cone normal de um conjunto convexo C é dado pela expressão apresentada na Equação (A.23). A Figura A9 ilustra o conceito.

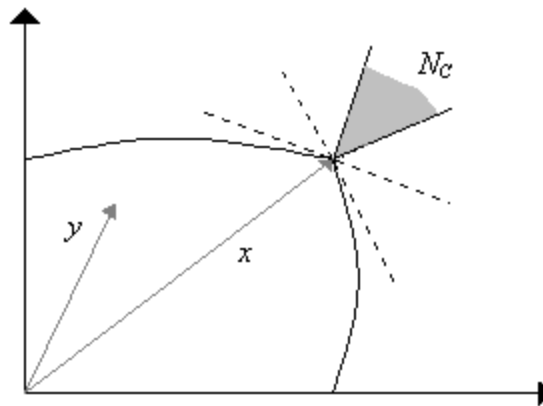


Figura A9 - Cone normal de um conjunto convexo C .

$$N_C(x) = \{\langle x^*, y - x \rangle \leq 0, \forall y \in C\} \quad (\text{A.23})$$

É interessante ressaltar que o subdiferencial de uma função indicatriz de qualquer conjunto convexo C é o cone normal desse conjunto, conforme apresentado nas Equações (A.24), (A.25) e (A.26).

$$\partial I_C(x) = \{I_C(z) - I_C(x) \geq \langle x^*, z - x \rangle\} \quad (\text{A.24})$$

$$\partial I_C(x) = \{0 \geq \langle x^*, z - x \rangle\} \quad (\text{A.25})$$

$$\partial I_C(x) = N_C(x) \quad (\text{A.26})$$

Considerando o a região P de tensões e forças termodinâmicas admissíveis, faz-se necessário, também, definir a região convexa das taxas de tensões e das taxas de forças termodinâmicas admissíveis. Adota-se, para essa região, o cone polar negativo de $\partial Ind_P(\sigma, A)$ definido em (A.27) e ilustrado pelas flechas na Figura A10.

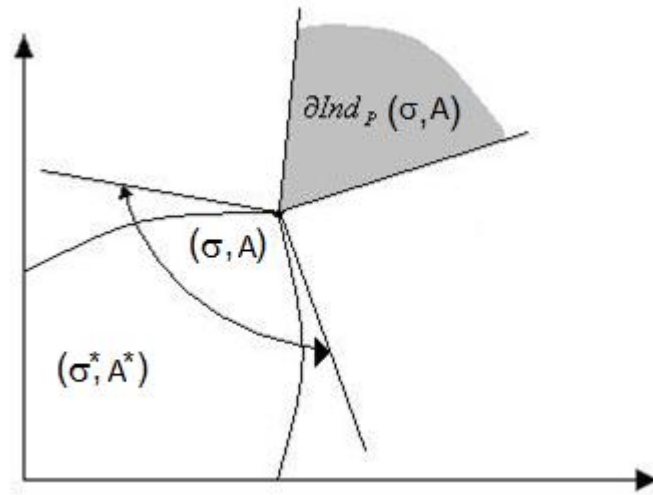


Figura A10 – Cone polar negativo.

$$(\dot{\sigma}, \dot{A}) \in \dot{P} = [\partial Ind_P(\sigma, A)]^{-1} \quad (\text{A.27})$$

A.9 Subdiferencial e Funções Conjugadas

Teorema 3. Seja X um espaço reflexivo de Banach, e seja $g: X \rightarrow R$ uma função própria, convexa e fraca semi-contínua. Dados $x \in X$ e $x^* \in X^*$, então

$$x^* \in \partial g(x) \leftrightarrow x \in \partial g_c(x^*) \quad (\text{A.28})$$

onde $\partial g(x)$ é o subdiferencial da função $g(x)$ e g_c é a função conjugada de g . As definições de funções próprias, funções convexas e funções fracas semi-contínuas (*l.s.c*) são apresentadas na seção A.6.

Considerando o espaço de tensões generalizadas no plano das forças termodinâmicas por P_A aplica-se o seguinte *Lema*.

Lema. Seja a função $f(\sigma, A)$ não-negativa e convexa, com $f(0) = 0$ e sejam as forças termodinâmicas A^* um ponto no interior do $\text{dom}(f)$ tal que $f(\sigma, A^*) > 0$. Seja $P_A = \{A / f(\sigma, A) \leq f(\sigma, A^*)\}$. Então $\dot{\alpha} \in \partial \text{Ind}_{P_A}$, se e somente se, existir $\lambda \geq 0$ tal que $\dot{\alpha} \in \lambda \partial f(\sigma, A^*)$. A função f pode ser uma função que apresenta bicos e cúspides.

A.10 Gradiente de Função em domínios de conjuntos compactos

Teorema 4. Para qualquer conjunto compacto $Y \subset \mathbb{R}^p$, seja $g: \mathbb{R}^n \times Y \rightarrow \mathbb{R}$ uma função que satisfaz as seguintes propriedades:

- para cada $x \in \mathbb{R}^n$, $g(x, \cdot)$ é semi-contínua superior;
- para cada $y \in Y$, $g(\cdot, y)$ é convexa diferenciável;
- a função $f = \sup_{y \in Y} g(\cdot, y)$ é finita em \mathbb{R}^n ;
- em algum $x \in \mathbb{R}^n$, $g(x, \cdot)$ é maximizada em um único $y(x) \in Y$

então, f é diferenciável em x , e seu gradiente é:

$$\nabla f(x) \leftrightarrow \nabla_x g(x, y(x)) \quad (\text{A.29})$$

A.11 Existência de solução única de um problema de minimização para uma função convexa

Teorema 5. Seja X um espaço reflexivo de Banach, K um subconjunto não-vazio, fechado e convexo de X e f um funcional próprio, convexo e l.s.c em K . Assumindo que:

$$f(x) \rightarrow \infty \quad \text{quando} \quad \|x\|_X \rightarrow \infty, x \in K \quad (\text{A.30})$$

Então, o problema de minimização:

$$\inf_{x \in K} f(x) \quad (\text{A.31})$$

possui solução. Além disso, se f é estritamente convexo, a solução do problema de minimização é única.

APÊNDICE B. SUPREMO E ÍNFIMO

O objetivo deste anexo é introduzir os conceitos do cálculo integral para enunciarmos a propriedade do supremo. O material deste anexo foi baseado nos conceitos do cálculo integral (Guidorizzi, 2001).

Seja S um subconjunto de um conjunto P parcialmente ordenado pela relação \leq .

Um elemento $M \in P$ é dito majorante ou cota superior de S se:

$$x \leq M, \quad \forall x \in S$$

Um elemento $m \in P$ é dito minorante ou cota inferior de S se:

$$m \leq x, \quad \forall x \in S$$

Um elemento $s \in P$ é dito supremo de S se for o menor dos majorantes:

$$x \leq s, \quad \forall x \in S \text{ e}$$

$$x \leq s', \quad \forall x \in S \Rightarrow s \leq s'$$

Um elemento $i \in P$ é dito ínfimo de S se for o maior dos minorantes:

$$i \leq x, \quad \forall x \in S \text{ e}$$

$$i' \leq x, \quad \forall x \in S \Rightarrow i' \leq i$$

Um majorante $M \in P$ é dito máximo de S se pertence a S . Um minorante $M \in P$ é dito mínimo de S se pertence a S .

B.1 Notação

Se um conjunto S possui máximo, ele é denotado:

$$\max S = \max_{x \in S} x$$

Se um conjunto S possui mínimo, ele é denotado:

$$\min S = \min_{x \in S} x$$

Se um conjunto S possui supremo, ele é denotado:

$$\sup S = \sup_{x \in S} x$$

Se um conjunto S possui ínfimo, ele é denotado:

$$\inf S = \inf_{x \in S} x$$

B.2 Exemplos

1. $[0,1]$ possui um elemento mínimo **0** e máximo **1**, o supremo desse conjunto é **1** e o ínfimo desse conjunto vale 0.

2. $[0,1)$ possui um elemento mínimo **0**, seu supremo nos reais é o **1** que não pertence ao conjunto. O ínfimo desse conjunto é igual ao seu elemento mínimo e o máximo não existe.

3. $\{x \in \mathbb{Q} : x^2 \leq 2\}$ Esse conjunto possui um **supremo** real, $\sqrt{2}$ e infinitas cotas superiores racionais. No entanto, não possui supremo nos números racionais.

B.3 Propriedade do Supremo

Todo conjunto de números reais, não-vazio e limitado superiormente admite um supremo.

Pelo fato do conjunto dos reais \mathbb{R} satisfazer a propriedade do supremo, dizemos que \mathbb{R} é um *corpo ordenado completo*. Os teoremas centrais do cálculo dependem dessa propriedade de \mathbb{R} . Todo conjunto de números reais, não-vazio e limitado inferiormente admite um ínfimo.

Considerando os reais estendidos, $\mathbb{R}_e = \mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$, podemos considerar: O supremo de um conjunto não limitado superiormente é definido como $+\infty$. O ínfimo de um conjunto não limitado inferiormente é definido como $-\infty$. Na notação de supremo, temos que uma função $f: D \rightarrow \mathbb{R}$ é limitada se e somente se:

$$\exists \sup_{x \in D} |f(x)|, \text{ ou considerando os reais estendidos, } \sup_{x \in D} |f(x)| < \infty.$$

B.4 Supremo e ínfimo do conjunto vazio

Ainda considerando os números reais estendidos, por completeza e a fim de manter a monotonicidade, definem-se o supremo e o ínfimo do conjunto vazio (quando este é visto como um subconjunto dos reais):

$$\sup \emptyset = -\infty$$

$$\inf \emptyset = \infty$$